

Heinz Josef Theis

Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten bei der praktischen
Anwendung numerischer Grundwassermodelle

Beim Fachbereich Architektur/Raum- und Umweltplanung/
Bauingenieurwesen der Universität Kaiserslautern zur Verleihung des
akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.) genehmigte
Dissertation

Tag der mündlichen Prüfung: 06.06.2005

Dekanin des Fachbereichs: Prof. Dr. Gabi Troeger-Weiß

Vorsitzender des Prüfungsausschusses: Prof. Dr.-Ing. Theo G. Schmitt

1. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Gero Koehler

2. Berichterstatter: Prof. Dr. András Bárdossy

3. Berichterstatter: Prof. Dr. Benedikt Toussaint

4. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Klaus Zipfel

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich im wesentlichen mit den aktuell zur Verfügung stehenden Werkzeugen der Behandlung von Unsicherheiten in den Ergebnissen von Grundwassermodellen im Zusammenhang mit der Anwendung der Modelle bei der Planung von hydraulischen Sanierungen des Untergrundes. Untersucht wird die Eignung verschiedener Verfahren für eine praxisbezogene Anwendung. Als Ergebnis werden Empfehlungen zur Verwendung der Methoden in Abhängigkeit der hydrogeologischen Gegebenheiten und Hinweise zur Weiterentwicklung der Verfahren formuliert.

Die Resultate von Grundwassermodellen werden zu Prognosezwecken in unterschiedlichen Zusammenhängen eingesetzt. Dazu gehören u.a. die Konzipierung von hydraulischen Sanierungsmaßnahmen. Für eine effiziente Ausführung einer Sanierung sollten Überdimensionierungen der notwendigen Einrichtungen (Brunnen, Pumpen, Aufbereitung) vermieden werden. Die hier untersuchten Methoden können dabei vorteilhaft eingesetzt werden, da sie es prinzipiell erlauben, die notwendigen Sicherheitszuschläge zu verringern und Erfolgswahrscheinlichkeiten für unterschiedliche Auslegungsvarianten anzugeben. Erfolgswahrscheinlichkeit bedeutet z.B. mit welcher Wahrscheinlichkeit ein einzuhaltender Grenzwert an einem bestimmten Punkt unterschritten wird. Die aktuell in der Praxis eingesetzten deterministischen Modelle können stattdessen nur einen Wert liefern, der eine nicht bekannte Eintretenswahrscheinlichkeit besitzt.

In dieser Arbeit wird gezeigt, dass Methoden der stochastischen Simulation, zusammen mit einer Grundwassermodellierung einen wesentlichen Beitrag zur Verbesserung der oben dargestellten Situation leisten können. Hierzu wird das SUFIX-Verfahren eingesetzt, das es erlaubt neben den Verfahren der Geostatistik (z.B. stochastische Simulation) auch den Sachverstand des Hydrogeologen, der sich meist nicht in 'harten' Zahlenwerten ausdrücken lässt, zwanglos zu integrieren. Beispiele hierfür sind Kenntnisse über großskalige Strukturen, wie Paläorinnen, die mit den Voraussetzungen für den Einsatz von stochastischen Simulationen nicht vereinbar sind. Auch sind vorhandene Informationen, die mit einer relativen hohen Unsicherheit behaftet sind (*soft data*) in diesem Konzept verwertbar.

Die Eingangsdaten eines Grundwassermodells liegen i.d. Regel nur als sporadische Punktmessungen vor und müssen durch Interpolation oder stochastische Simulation generiert werden, um ein lückenloses Abbild des Untergrundes bzw. der Eigenschaften des Untergrundes zu erhalten. Liegt ein vollständiges interpoliertes Abbild (hydrogeologisches Modell) vor, muss wiederum eine Vereinfachung vorgenommen werden, da ein numerisches Modell nur punkt- bzw. flächengemittelte Eingabedaten verwenden kann.

Der hierdurch bedingte Verlust an Information über die Variabilität der Modellparameter unterhalb der räumlichen Modelldiskretisierung wirkt sich vor allem bei der Stofftransportmodellierung aus, da hier die Ausbreitung entlang bevorzugter Fließwege eine entscheidende Rolle spielen kann.

Eine zusätzliche Quelle der Unsicherheit entsteht dadurch, dass die Lage dieser Strukturen und ihr räumlicher Zusammenhang (Topologie) nicht hinreichend bekannt sind.

Anhand zweier Fallbeispiele aus der praktischen Anwendung von numerischen Modellen wird nachgewiesen, dass sich das SUFIX-Verfahren generell als geeignet zur Quantifizierung von Prognoseunsicherheiten darstellt. Vorteile des Verfahrens sind die Kombinationsmöglichkeiten mit beliebigen Methoden zur Abbildung der Untergrundheterogenität. Es können z.B. stochastische Simulationen oder auch eine konstante manuelle Zonierung verwendet werden. Ein weiterer gewichtiger Vorteil ist der, dass die Berechnungsmethodik der Grundwasserströmung und des Stofftransportes keinen Einschränkungen, wie Linearisierung der Gleichungen u.ä. unterworfen ist. Ebenso sind beliebige Randbedingungen verwendbar, wobei auch der Typ der Bedingungen als unsicherer Parameter eingesetzt werden kann.

Sollen die Parameter optimiert werden, ist in praktischen Anwendungsfällen die Koppelung von stochastischer Simulation und z.B. einem *Bayes'schen Updating*-Verfahren eine einfach zu implementierende Lösung. Hiermit ist dann auch die Kalibrierung beliebiger Randbedingungen möglich, die z.B. als Parameter mit einer nominalen Kodierung berücksichtigt werden können.

Die Untersuchungsergebnisse zeigen, dass das Verfahren zur Abbildung der Heterogenität dem Aquifer angepasst gewählt werden muss. Gauss-basierte Verfahren, wie *Turning-Bands*, sind demnach am ehesten für die Simulation von relativ homogenen Aquiferen geeignet, während bei sehr heterogenen Strukturen, d.h. großer Variabilität der Parameterwerte, am ehesten Indikator-basierte Verfahren in Frage kommen. Noch besser schneidet in diesem Fall die manuelle Zonierung ab, was vor allem damit zu erklären ist, dass bei sehr heterogenen Untergrundverhältnissen v.a. die Struktur mit eventuell nur deterministisch erfassbaren übergeordneten Elementen von ausschlaggebender Bedeutung ist.

Als Simulationsverfahren mit dem größten Entwicklungspotential kann man generell diejenigen Verfahren ansehen, die auch nicht *Gauss*-verteilte Daten verwenden, wie z.B. die hier verwendeten Indikatorbasierten Verfahren. Als ebenfalls sehr gut geeignete Verfahren stellten sich *Simulated Annealing* in der Variante als Postprozessor zusammen mit einem frei definierbaren 'Trainingsbild' dar.

Die Untersuchungsergebnisse zeigten aber auch, dass neben der Wahl der geeigneten mathematischen Methoden eine weitere grundlegende Bedingung erfüllt sein muss, nämlich ein widerspruchsfreies und stimmiges, an den Einsatzzweck angepasstes konzeptionelles hydrogeologisches Modell. Zu dessen Konzeption muss der Anwender bzw. Modellierer über Kenntnisse der großräumigen Strukturen verfügen, die sich aus der Genese des Untergrundes ergeben und nur durch eine fachliche Interpretation erreichbar sind. Hierzu gehören Schichtungen, Paläorinnen, anisotrope Bodeneigenschaften durch Terrassierung, usw..

Die Einbeziehung dieser Expertenkenntnisse, sowie die Sicherstellung eines geeigneten hydrogeologischen Modells für die numerische Modellierung sind Themenbereiche, die im Zusammenhang mit einer Unsicherheitsanalyse noch erheblichen Forschungsbedarf aufweisen.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
1 Einführung	1
1.1 Problematik	1
1.2 Zielsetzung	4
1.3 Vorgehen	5
2 Die Unsicherheit in den Ergebnissen von Grundwassermodellen	11
2.1 Allgemeines	11
2.2 Unsicherheiten bei der Erkundung kontaminierter Standorte	14
2.2.1 Die natürliche Heterogenität des Untergrundes	14
2.2.2 Bedeutung der Untergrundstrukturen für die Schadstoffausbreitung	19
2.2.3 Bedeutung der Stoffeigenschaften	20
2.3 Beschreibung der Heterogenität des Untergrundes in einem Hydrogeologischen Modell	22
2.4 Der stochastische Ansatz zur mathematischen Beschreibung der Heterogenität des Untergrundes	26
2.4.1 Grundzüge des stochastischen Bodenmodells	26
2.4.2 Geostatistische Interpolation	28
2.4.3 Die Verbindung des stochastischen Bodenmodells mit Konzepten der Hydrogeologie	33
2.4.4 Die stochastische Simulation	38
2.4.5 In dieser Arbeit eingesetzte Verfahren zur Abbildung der Heterogenität	39
2.5 Das mathematisch-numerische Modell als Transferfunktion zwischen Erkundung und Prognose	40
2.6 Lösungsverfahren der stochastischen Strömungs- und Transportgleichungen	43
2.6.1 Die Monte Carlo Simulation	43
2.6.2 Analytische Verfahren	46
2.6.3 Das Bayes-Theorem	46
2.6.4 Methodenvergleich	47
2.7 Umsetzung in ein praxisgeeignetes Vorgehen zur Quantifizierung der Prognoseunsicherheit	49
2.7.1 Das SUFIX Verfahren	50
2.7.2 Das Problem der Zielfunktion	55
2.7.3 Integration von Daten unterschiedlichen Typs	60
2.8 Alternative Verfahren	63
2.8.1 GLUE Methode	63
2.8.2 Methode der 'schrittweisen Regression'	63
2.8.3 Inverse Kalibrierung zusammen mit der Pilot Point Methode	64
2.8.4 Trial and Error Kalibrierung	65
3 Fallstudie 1: Ehemaliges Raffinerie-Gelände	67
3.1 Datenauswertung	67
3.1.1 Untersuchungsgebiet	67
3.1.2 Geologische Verhältnisse	67
3.1.3 Tracerversuch	71
3.2 Hydrogeologisches Modell	76

3.3	Numerisches Modell	78
3.4	Anwendung des SUFIX-Verfahrens zur Unsicherheitsanalyse	79
3.4.1	Generierung der <i>soft data</i> aus Bohrbeschreibungen	79
3.4.2	Variographie	82
3.4.3	Propagationspfad TB	84
3.4.4	Propagationspfad TG	88
3.4.5	Propagationspfad SA	92
3.4.6	Propagationspfad MZ	94
3.4.7	Vergleichsrechnungen - Fälle TAE1, TAE2, TAE4, COK	94
3.5	Ergebnisse und Bewertung	96
3.5.1	Stochastische Simulationen - kontinuierliche Heterogenität	97
3.5.2	Stochastische Simulationen - diskrete Heterogenität	103
3.5.3	Propagationspfad SA (Simulated Annealing)	106
3.5.4	Propagationspfad MZ (Manuelle Zonierung)	107
3.5.5	Vergleichsrechnungen	109
3.6	Zusammenfassung	112
4	Fallstudie 2: Neuwieder Becken	113
4.1	Datenauswertung	113
4.1.1	Untersuchungsgebiet	113
4.1.2	Geologische Verhältnisse	113
4.1.3	Konzentrationsdaten aus der Sanierung	116
4.2	Hydrogeologisches Modell	121
4.3	Numerisches Modell	124
4.4	Anwendung des SUFIX-Verfahrens zur Unsicherheitsanalyse	128
4.4.1	Generierung der <i>soft data</i> aus Bohrbeschreibungen	128
4.4.2	Variographie	128
4.4.3	Propagationspfad TB	133
4.4.4	Propagationspfad TG	135
4.4.5	Propagationspfad SA	136
4.4.6	Propagationspfad MZ	137
4.4.7	Deterministische Vergleichsrechnungen	139
4.5	Ergebnisse und Bewertung	139
4.5.1	Stochastische Simulationen - kontinuierliche Heterogenität	139
4.5.2	Stochastische Simulationen - diskrete Heterogenität	142
4.5.3	Deterministische Vergleichsrechnungen	146
4.6	Zusammenfassung	147
5	Bewertung der eingesetzten Verfahren	149
5.1	Eignung des SUFIX-Verfahrens für den praktischen Einsatz bei der Grundwassermodellierung	150
5.1.1	Bewertung der Verfahren zur Abbildung der Heterogenität anhand einer integralen Zielfunktion	150
5.1.2	Eignung der Propagationspfade für das „Bayes'sche Updating“	155
5.1.3	Beispiel für die Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten	158
5.1.4	Beschränkungen des SUFIX-Verfahrens	159

5.2	Ausblick	160
5.2.1	Konditionierung	161
5.2.2	Datengrundlage	162
5.3	Fazit	163
Anhang A Ergebnistabellen		165
A.1	Fallstudie 1	165
A.2	Fallstudie 2	177
Anhang B Ergebnisabbildungen zur Fallstudie 1		179
B.1	Korrelation zwischen hard- und soft data	179
B.2	Manuelle Zonierung	181
B.3	Die Heterogenitätsabbildungen nach dem Cokriging Verfahren	183
B.4	Ergebnisse der numerischen Modellierung	185
Anhang C Ergebnisabbildungen zur Fallstudie 2		199
C.1	Beispiele für die Simulationen nach dem TURNING-BANDS Verfahren:	199
C.2	Beispiele für die Simulationen nach dem Truncated GAUSS Verfahren:	202
C.3	Sequential Indicator Simulation und Simulated Annealing	205
C.4	Manuelle Zonierung	206
C.5	Ergebnisse der numerischen Modellierung	208
Anhang D Definitionen		209
D.1	Das Zufallsmodell	209
D.2	Gauss'sche Modelle -- Effektive Parameter	213
D.3	Methoden der stochastischen Simulation	215
D.4	Stichprobenauswahl bei Monte Carlo Simulationen	223
D.5	Analytische Lösungsverfahren der stochastischen Strömungsgleichung	225
D.6	Unsicherheit - Chaos -Fehler	226
D.7	Stoffeigenschaften	227
Anhang E Glossar		231
Anhang F Symbole und Abkürzungen		235
Literaturverzeichnis		237
Lebenslauf		249

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1:	Abhängigkeit der Sanierungszeit von der Heterogenität des Untergrundes in einem synthetischen Beispielfall (DVWK , 1991)	3
Abbildung 1-2:	Sanierungskosten in einem synthetischen Beispielfall in Abhängigkeit von Gebietsgröße und Durchlässigkeit des Mediums (aus DVWK , 1991, nach EPA , 1985)	4
Abbildung 1-3:	Schematische Darstellung des Kostenverhaltens (aus DVWK , 1991).....	7
Abbildung 1-4:	Beziehung zwischen Quantität der Modell-Grunddaten, deren Beschaffungsaufwand und der darin inhärent vorhandenen Unsicherheit.....	9
Abbildung 1-5:	Schema des Bearbeitungsablaufs für eine numerische Modellierung unter Einbeziehung von Unsicherheitsaspekten	10
Abbildung 2-1:	Skalen der dispersiven Stoffausbreitung (aus KINZELBACH , 1992)	16
Abbildung 2-2:	Entwickeln des Hydrogeologischen Modells und Zuweisung von Aquiferparametern (aus FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE , 1999).....	26
Abbildung 2-3:	Vier Realisationen eines eindimensionalen Zufallsfeldes (aus BIERKENS ,1994) ..	30
Abbildung 2-4:	Kennwerte zur Beschreibung der theoretischen Variogramm-modelle vom Typ sphärisch, exponentiell und Gauss.....	32
Abbildung 2-5:	Schematisches Block-Diagramm von (a) komplex geschichteten alluvialen Sedimenten und (b) die Struktur dieser Sedimente, wenn sie mit einer Indikator-Funktion interpretiert werden (aus JOHNSON & DREISS , 1989).....	36
Abbildung 2-6:	Schematische Indikator-Variogramme für den Block aus Abbildung 2-5.....	37
Abbildung 2-7:	Grundwassermodell als Transferfunktion zwischen den Erkundungsdaten und den prognostizierten Zustandsvariablen h und c	41
Abbildung 2-8:	Prinzip der stochastischen Strmröhrenmodelle (aus CIRPKA , 1997).....	44
Abbildung 2-9:	Schema der Monte Carlo Simulationen.....	46
Abbildung 2-10:	Unterteilung eines verteilten Parameters in gleich große Straten für eine vollständige stratifizierte Probenahme. Gepunktete Linien zeigen die Mittelwerte der Straten an. Verwendung in Schritt SUFIX 1B (aus ABBASPOUR et al. 1997).....	52
Abbildung 2-11:	Schematische Darstellung der Fortpflanzung der Unsicherheit in einer vollständigen Stichprobennahme. Die 250 möglichen Werte der Zielfunktion werden in einer kumulativen Häufigkeitsverteilung ausgewertet. Entspricht im Prinzip dem Schritt SUFIX 3 (aus ABBASPOUR et al. 1997).....	53
Abbildung 2-12:	Auswertung nach Häufigkeit der Unterschreitung einer Zielfunktion. Anwendung im Schritt SUFIX 4 (aus ABBASPOUR et al. 1997).....	53
Abbildung 2-13:	Prinzipieller Ablauf einer Modellierung unter Einbeziehung des SUFIX-Verfahrens.....	55
Abbildung 2-14:	Verschiedene Zielfunktionen führen zu verschiedenen Gütewerten bei gleichen Modellergebnissen.....	56
Abbildung 2-15:	Auswertungsbeispiele für die verschiedenen Zielfunktionstypen aus Tabelle 2-11, (Reihenfolge der Kurzbez. ist: Zeit,Ort,Simulation)	59
Abbildung 3-1:	Lage des Untersuchungsgebietes.....	68
Abbildung 3-2:	Lage der Aufschlussbohrungen	69
Abbildung 3-3:	Schematische Geologische Situation im Untersuchungsgebiet.....	69
Abbildung 3-4:	Bohrprofile entlang Schnitt 1	70
Abbildung 3-5:	Bohrprofile entlang Schnitt 2	70
Abbildung 3-6:	Konzentrationsganglinien an der Messstelle TS1.2F (Flach).....	72
Abbildung 3-7:	Konzentrationsganglinien an der Messstelle TS1.2T (Tief)}	73
Abbildung 3-8:	Konzentrationsganglinien an der Messstelle Br09	73
Abbildung 3-9:	Räumliche Modelldiskretisierung und Randbedingungen	80

Abbildung 3-10:	Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 1)	81
Abbildung 3-11:	Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 2)	81
Abbildung 3-12:	Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 3)	82
Abbildung 3-13:	Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 1	83
Abbildung 3-14:	Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 2	83
Abbildung 3-15:	Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 3	84
Abbildung 3-16:	Prinzipieller Ablauf des SUFIX- Verfahrens mit Gauss-basierten Simulationen (vgl. mit Abbildung 2-13).	85
Abbildung 3-17:	Fortpflanzung der Unsicherheit in den Variogramm-Reichweiten (range als a-priori-Verteilung für die Modellrechnungen)	86
Abbildung 3-18:	Turning-Bands-Simulation für $\ln(k_f)$, Schicht 1, 2. Simulation (SUFIX2)	87
Abbildung 3-19:	Schema der Parameterkombinationen im Propagationspfad TB (Schritt SUFIX3)	88
Abbildung 3-20:	Vergleich zwischen konditionierter und unkonditionierter Simulation (Simulation1, Schicht 1, Zeile 6 des numerischen Modells)	89
Abbildung 3-21:	Gesamtablauf des SUFIX Verfahrens im Propagationspfad TG	90
Abbildung 3-22:	Mögliche Parameterkombinationen (SUFIX 3) im Propagationspfad TG	91
Abbildung 3-23:	Beispiel für Truncated-Gauss Simulation für $\ln(k_f)$, zu Schritt SUFIX 2.	92
Abbildung 3-24:	Schema der Parameterkombinationen im Fall SA (Schritt SUFIX3)	93
Abbildung 3-25:	Schema der Parameterkombinationen im Propagationspfad MZ (Schritt Suffix3)	95
Abbildung 3-26:	Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID	97
Abbildung 3-27:	Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TBC (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID	98
Abbildung 3-28:	Wert des Gütekriteriums low-quartil für jeden Zeitschritt im Fall TB	100
Abbildung 3-29:	Wert des Gütekriteriums low-quartil für jeden Zeitschritt im Fall TBC	100
Abbildung 3-30:	Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion, Fall TB (Gütwert ist <i>low-quartil</i>)	100
Abbildung 3-31:	Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion, Fall TBC (Gütwert ist <i>low-quartil</i>)	100
Abbildung 3-32:	<i>a posteriori</i> -Verteilung von <i>range</i> (vgl. mit Abbildung 3-17)	101
Abbildung 3-33:	<i>Updating</i> der k_f -Verteilung am Bohrpunkt 11	102
Abbildung 3-34:	Absolute Häufigkeiten der RMSE Fall TG (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID	103
Abbildung 3-35:	Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion im Fall TG (Gütwert ist <i>low quartil*0.5</i>)	104
Abbildung 3-36:	Vergleich von Ausgangsverteilung und <i>a posteriori</i> -Verteilung der k_f -Intervalle und der Anisotropiefaktoren der Zwischenschicht (Fall TG)	105
Abbildung 3-37:	Absolute Häufigkeiten der RMSE (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), Fall SA, ZF-Typ: -ID	106
Abbildung 3-38:	Absolute Häufigkeiten der RMSE (Strömung) - Flach (oben) und Tief (unten), Fall MZ, ZF-Typ: -ID	107
Abbildung 3-39:	Vergleich von Ausgangsverteilung und <i>a posteriori</i> -Verteilung der k_f -Intervalle (Fall MZ)	108
Abbildung 3-40:	Vergleich der Güte der Transportmodellierung mit verschiedenen Zielfunktionen (Fall MZ)	110
Abbildung 4-1:	Vereinfachte geologische Karte des östlichen Teils des Neuwieder Beckens	114
Abbildung 4-2:	Geologische Schnitte durch das Neuwieder Becken	115
Abbildung 4-3:	Typische Bohrprofile im Neuwieder Becken	116
Abbildung 4-4:	Lage des Untersuchungsgebietes mit Bohransatzpunkten	117
Abbildung 4-5:	Typische Kornsummenlinien im Neuwieder Becken. (Aus GIEBEL et al., 1990)	118

Abbildung 4-6:	Absolute Häufigkeiten der sich aus der soft data-Generierung ergebenden hydraulischen Durchlässigkeiten	119
Abbildung 4-7:	Höhenlage der Basis des Grundwasserleiters	120
Abbildung 4-8:	Paläowasserspiegel des Rheins im Bereich des Neuwieder Beckens	121
Abbildung 4-9:	Näheres Untersuchungsgebiet mit Lage der Messstellen für Konzentrationsmessungen im Grundwasser.....	122
Abbildung 4-10:	Konzentrationsverläufe (Tri) an vier ausgewählten Messstellen im Sanierungsgebiet.....	123
Abbildung 4-11:	Interpolierte Konzentrationen zu Beginn der Messkampagne (6.4.1984, Werte für Tri in µg/l).....	124
Abbildung 4-12:	Interpolierte Konzentrationen am Ende der Messkampagne (1.4.1986, Werte für Tri in µg/l).....	124
Abbildung 4-13:	Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der in Tabelle 4-3 genannten Indikatorbereiche	126
Abbildung 4-14:	Vertikale räumliche Diskretisierung des numerischen Modells	127
Abbildung 4-15:	Horizontale räumliche Diskretisierung des numerischen Modells.....	127
Abbildung 4-16:	Modifikation der Tiefenkoordinate entsprechend dem Fallenwinkel.....	129
Abbildung 4-17:	Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 1 (62-66m+NN).....	129
Abbildung 4-18:	Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 2 (58-62m+NN)	129
Abbildung 4-19:	Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 3 (54-58m+NN).....	130
Abbildung 4-20:	Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 4 (50-54m+NN).....	130
Abbildung 4-21:	Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 5 (46-50m+NN).....	130
Abbildung 4-22:	Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 1 (62-66m+NN)	131
Abbildung 4-23:	Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 2 (58-62m+NN)	131
Abbildung 4-24:	Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 3 (54-58m+NN)	131
Abbildung 4-25:	Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 4 (50-54m+NN)	131
Abbildung 4-26:	Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 5 (46-50m+NN)	132
Abbildung 4-27:	Variogramme Gesamtdatensatz, untransformiert	133
Abbildung 4-28:	Variogramme Gesamtdatensatz, normal-score transformiert	133
Abbildung 4-29:	Prinzipieller Ablauf des SUFIX-Verfahrens im Propagationspfad 1	134
Abbildung 4-30:	SIS und SA im Propagationspfad (SUFIX 3).....	138
Abbildung 4-32:	Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Transport) - links und Fall TBC (Transport) - rechts, ZF-Typ: DID	140
Abbildung 4-31:	Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Strömung) - links und Fall TBC (Strömung) - rechts, ZF-Typ: -ID	140
Abbildung 4-33:	Propagationspfad TB (unkonditionierte Simulationen): Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen. ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16	141
Abbildung 4-34:	Propagationspfad TBC (konditionierte Simulationen): Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen. ZF-Typ: DDI. 141	141
Abbildung 4-35:	Häufigkeiten der RMSE, Fall TG, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID.....	142
Abbildung 4-37:	Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall SA, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID.....	143
Abbildung 4-36:	Propagationspfad TG: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen. ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16	143
Abbildung 4-38:	Propagationspfad SA: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DDI). Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16).	144

Abbildung 4-40: Propagationspfad MZ: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen (am Endzeitpunkt) differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16).	145
Abbildung 4-39: Häufigkeiten der RMSE, Fall MZ, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID	145
Abbildung 4-41: Residuen (Rechnung-Messung, Endzeitpunkt) der deterministischen Vergleichsrechnungen differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DD-).....	147
Abbildung 5-2: Der updating Prozess bei einem geeigneten hydrogeologischen Modell	156
Abbildung 5-1: Analogie zwischen dem Ergebnis einer Unsicherheitsanalyse an einer Referenzmessstelle und einem Schrotschuss.	156
Abbildung 5-3: Unterschreitungswahrscheinlichkeit eines Grenzwerts an einem vorgegebenen Punkt	159
Abbildung 5-4: Flächige Überschreitungswahrscheinlichkeit eines Grenzwerts (Fallstudie 2; Fall TG)	160
Abbildung B-1: Korrelation zwischen <i>hard</i> und <i>soft data</i> in Modellschicht 1	179
Abbildung B-3: Korrelation zwischen <i>hard</i> und <i>soft data</i> in Modellschicht 3	180
Abbildung B-2: Korrelation zwischen <i>hard</i> und <i>soft data</i> in Modellschicht 2	180
Abbildung B-4: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der <i>soft data</i> (Schicht1 (83-86m+NN), Fall TAE4 und TAE5)	181
Abbildung B-5: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der <i>soft data</i> (Schicht2 (80-83m+NN), Fall TAE4 und TAE5)	181
Abbildung B-7: Abgrenzung der k_f -Bereiche Trial-and-Error Verfahren (Fall TAE1)}	182
Abbildung B-6: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der <i>soft data</i> (Schicht3 (70-80m+NN), Fall TAE4 und TAE5)	182
Abbildung B-9: Abgrenzung der k_f -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht1	183
Abbildung B-8: Abgrenzung der k_f -Bereiche Trial-and-Error Verfahren (Fall TAE2)	183
Abbildung B-10: Abgrenzung der k_f -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht2	184
Abbildung B-11: Abgrenzung der k_f -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht3	184
Abbildung B-12: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 global besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TB)	186
Abbildung B-13: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als <i>mean-box</i> Darstellung (Fall TB)	187
Abbildung B-14: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten globalen und der jeweiligen besten lokalen Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TBC)	188
Abbildung B-15: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als <i>mean-box</i> Darstellung (Fall TBC)	189
Abbildung B-16: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TG)	190
Abbildung B-17: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als <i>mean-box</i> Darstellung (Fall TG)	191
Abbildung B-18: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TAE5)	192
Abbildung B-19: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als <i>mean-box</i> Darstellung (Fall TAE5)	193
Abbildung B-20: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TBC aus Tabelle A-3 (ZF-Typ IDI)	194
Abbildung B-21: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TG aus Tabelle A-6 (ZF-Typ IDI)	194
Abbildung B-22: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TAE5 aus Tabelle A-15	

(ZF-Typ IDI)	195
Abbildung B-23: Grundwasserhöhengleichen im Fall TAE1	195
Abbildung B-24: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TAE1 aus Tabelle A-11 (ZF-Typ ID-)	196
Abbildung B-25: Grundwasserhöhengleichen im Fall TAE2	196
Abbildung B-26: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TAE2 (ZF-Typ ID-) .	197
Abbildung B-27: Grundwasserhöhengleichen im Fall TAE4	197
Abbildung B-28: Grundwasserhöhengleichen im Fall Cokriging (COK)	198
Abbildung B-29: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall COK (ZF-Typ IDI)	198
Abbildung C-1: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 1, 62-66m+NN)	199
Abbildung C-2: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 2, 58-62m+NN)	200
Abbildung C-3: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 3, 54-58m+NN)	200
Abbildung C-4: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 4, 50-54m+NN)	201
Abbildung C-5: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 5, 46-50m+NN)	201
Abbildung C-6: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 1, 62-66m+NN)	202
Abbildung C-7: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 2, 58-62m+NN)	202
Abbildung C-8: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 3, 54-58m+NN)	203
Abbildung C-9: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 4, 50-54m+NN)	203
Abbildung C-10: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 5, 46-50m+NN)	204
Abbildung C-11: Beispiel für die Anwendung des SA-Verfahrens als Postprozessor für SIS-Simulationen (Modellschicht 2, gleiches Trainingsimage für alle Schichten)	205
Abbildung C-12: Manuelle Abgrenzung der kf-Bereiche bei TAE4 und TAE5 (Schicht 2, 58-62m+NN)	206
Abbildung C-13: Manuelle Abgrenzung der kf-Bereiche bei TAE4 und TAE5 (Schicht 3, 54-58m+NN)	206
Abbildung C-14: Manuelle Abgrenzung der kf-Bereiche bei TAE4 und TAE5 (Schicht 4, 50-54m+NN)	207
Abbildung C-15: Manuelle Abgrenzung der kf-Bereiche bei TAE4 und TAE5 (Schicht 5, 46-50m+NN)	207
Abbildung C-16: Variationskoeffizient für Propagationsspfad TG (ZF-Typ: DDI)	208
Abbildung C-17: Variationskoeffizient Propagationsspfad SA (ZF-Typ: DDI)	208
Abbildung D-1: Kovarianzfunktion und Variogrammbeispiel (Eine Kovarianzfunktion und das zugehörige Variogramm für ein i.w.S. stationäres Feld (1) und ein Variogramm für ein intrinsisches Zufallsfeld (2)). (aus BIERKENS ,1994).	212
Abbildung D-2: Vergleich von Realität, Krigingschätzung und konditionaler Simulation (nach DE FOUQUET , 1994).	216
Abbildung D-3: Schritte bei der Erstellung einer konditionalen Simulation (nach DE FOUQUET , 1994)	217
Abbildung D-4: Vereinfachung der Differenzenbildung bei der Konditionierung nach FOUQUET .	218
Abbildung D-5: Indicator Codierung von 'harten' Daten und 'weichen' Intervall-Daten	219

Abbildung D-6: Länge der Unterintervalle abhängig von der Wahrscheinlichkeitsverteilung, oben: gleichförmig, unten: Normalverteilung (aus Peck et al., 1988).	224
Abbildung D-7: Verteilung der gezogenen Werte in den Unterintervallen	225

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Ursachen für unsichere Modellprognosen	12
Tabelle 2-2: Skaleneinteilung nach DURNER (1991) und TIETJE (1993)	15
Tabelle 2-3: Durch eine Erkundung gewinnbare Parameter für eine numerische Modellierung der Grundwasserströmung und des Stofftransports	18
Tabelle 2-4: Physikalische Umgebungsparameter, die den Stofftransport direkt beeinflussen.	19
Tabelle 2-5: Wichtige Eigenschaften der mit dem Grundwasser transportierten Schadstoffe bei einer hydraulischen Sanierung	21
Tabelle 2-6: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Strömungsmodellierung.....	23
Tabelle 2-7: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Transportmodellierung.	24
Tabelle 2-8: Übliche theoretische Variogrammmodelle	32
Tabelle 2-9: In dieser Arbeit eingesetzte Verfahren, klassifiziert nach KOLTERMANN & GORELICK, (1996).	40
Tabelle 2-10: Bewertung der Verfahren zur Lösung der stochastischen Strömungsgleichung (nach Literaturangaben)	47
Tabelle 2-11: Mögliche Formulierungen für Zielfunktionen (ZF) bei Transportberechnungen (stationär); die Kennung in Spalte 1 gibt den Typ der Auswertung in der Reihenfolge Zeit, Ort, Simulation an.	57
Tabelle 2-12: Anmerkung zu den Kurzbezeichnungen für die Zielfunktionstypen.	58
Tabelle 3-1: Tracerdosierung	72
Tabelle 3-2: Ermittlung der Durchlässigkeiten	74
Tabelle 3-3: Vertikaler Modellaufbau.....	77
Tabelle 3-4: Statistische Kenngrößen der Modellschichten 1 bis 3	80
Tabelle 3-4: Statistische Kenngrößen der Modellschichten 1 bis 3	82
Tabelle 3-5: Variogrammparameter der Modellschichten 1 bis 3 (Sphärisches theoretisches Modell)	84
Tabelle 3-6: Einteilung der k_f -Werte in 4 Klassen zur Anwendung des SUFIX-Verfahrens	91
Tabelle 3-7: Beste Simulationen der Strömungs- und Transportberechnungen im Propagationspfad TB.....	101
Tabelle 3-8: Globale Güte der besten Simulationen	104
Tabelle 4-1: Auswertung von Kornsummenlinien	118
Tabelle 4-2: : Ermittelte k_f -Werte für das Neuwieder Becken aus Literaturrecherchen.....	119
Tabelle 4-3: Intervalle für die Berechnungen der Auftretenswahrscheinlichkeiten von typischen Untergrundstrukturen	124
Tabelle 4-4: Schichteneinteilung des hydrogeologischen Modells.....	126
Tabelle 4-5: Statistische Kennwerte und Variogrammparameter	133
Tabelle 4-6: Summenhäufigkeiten der Durchlässigkeiten, eingeteilt in Indikatorintervalle.	136
Tabelle 4-7: Indikatorintervalle für die Sequential Indicator-Simulationen	137
Tabelle 4-8: Variogrammparameter für die Sequential Indicator Simulationen.....	137
Tabelle 4-9: Auswertung der Residuen für die deterministischen Vergleichsrechnungen (ZF-Typ: - I- für die Strömungsberechnung bzw. DI- für die Transportberechnung)	146
Tabelle 5-1: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 1.	150
Tabelle 5-2: Ranking der Methoden nach low-Quartil (die 25% besten Ergebnisse, Fallstudie 1)	151
Tabelle 5-3: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 2 (Güte der Ergebnisse am Stichtag 1.4.1986).....	151
Tabelle 5-4: Ranking der Methoden nach low-Quartil (die 25% besten Ergebnisse, Fallstudie 2)	152

Tabelle A-1: Güte der Strömungsberechnung im Fall TBC - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	165
Tabelle A-2: Güte der Strömungsberechnung im Fall TBC - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	166
Tabelle A-3: Güte der Transportrechnung im Fall TBC, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (Zielfunktionstyp IDI)	167
Tabelle A-4: Güte der Strömungsberechnung im Fall TG - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	168
Tabelle A-5: Güte der Strömungsberechnung im Fall TG - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	168
Tabelle A-6: Güte der Transportrechnung im Fall TG, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ IDI)	169
Tabelle A-7: Güte der Strömungsberechnung im Fall SA - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	170
Tabelle A-8: Güte der Strömungsberechnung im Fall SA - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp -DI)	170
Tabelle A-9: Güte der Transportrechnung im Fall SA, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ IDI)	171
Tabelle A-10: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE1 als Differenz Rechnung-Messung (Zielfunktionstyp -D-)	172
Tabelle A-11: Güte der Transportrechnung im Fall TAE1 (ZF-Typ ID-)	173
Tabelle A-12: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE2 als Differenz Rechnung-Messung (ZF-Typ -D-)	173
Tabelle A-13: Güte der Simulationsberechnung im Fall TAE5 - Flach -, als lokale Residuen über alle Simulationen integriert.	174
Tabelle A-15: Güte der Transportrechnung im Fall TAE5 (Gütekriterium IDI)	175
Tabelle A-14: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE5 - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Gütekriterium -DI)	175
Tabelle A-16: Zuordnung der Messtellennummern in den Abbildungen 4-33, 4-34, 4-36, 4-38, 4-40 und 4-41 zu den tatsächlichen Namen.	177
Tabelle D-1: Eigenschaften von repräsentativen organischen Schadstoffen im Grundwasser (aus AFGWC, 1994)	230

1 Einführung

Sicher ist, dass nichts sicher ist. Selbst das nicht.

Joachim Ringelnatz

1.1 Problematik

Die Konzeption und Durchführung von hydraulischen Sanierungsmaßnahmen an einem Standort mit kontaminiertem Grundwasser verlangt die Einbeziehung einer Vielzahl von komplexen Randbedingungen. Von besonderer Bedeutung sind hierbei eine umfassende Erkundung und darauf aufbauend eine fachgerechte Berücksichtigung der hydrogeologischen Gegebenheiten des Standorts. Wichtig für die Beurteilung der Effizienz einer Maßnahme ist zudem die Einbeziehung einer Unsicherheitsbetrachtung bereits in der Planungsphase, was jedoch bis dato nur in Ausnahmefällen durchgeführt wird. Dass derartige Betrachtungen bisher nicht Standard der Technik sind, liegt wohl im wesentlichen darin begründet, dass der Mehraufwand gegenüber den Standardverfahren einerseits als zu groß angesehen wird und andererseits kommerziell arbeitende Büros zudem die zusätzlichen Kosten den Auftraggebern nicht vermitteln können.

Als ein Standardverfahren bei der Konzeption und Durchführung der Sanierung von Grundwasserschadensfällen werden numerische Grundwassermodelle eingesetzt, die sich in den letzten 30 Jahren zu einem anerkannten und bewährten Instrument entwickelt haben. Die Modellergebnisse werden in der Regel als Grundlage für Prognosen der zeitlichen und räumlichen Entwicklung von Grundwasserständen und Stoffkonzentrationen genutzt. Die quantitativen und qualitativen Anforderungen an die Datengrundlage eines mathematisch-numerischen Grundwassermodells¹ sind jedoch sehr hoch. Neben den notwendigen Randbedingungen muss für jeden Punkt des Berechnungsgitters ein Wert für die notwendigen Modellparameter bereitgestellt werden. Zu diesen Festlegungen gehören die Abgrenzung von hydrogeologischen Einheiten, die diesen Einheiten zugeordneten Werte der hydraulischen Durchlässigkeit (k_f -Wert) und die Kennwerte dispersiven, chemischen und biologischen Prozesse, die Auswirkungen auf den bzw. die betrachteten Schadstoffe haben können.

1. Unter Grundwassermodellen sollen in dieser Arbeit zusammenfassend sowohl Strömungs- als auch Stoffausbreitungsmodelle verstanden werden. Letztere werden in der Grundwasserhydrologie auch als Transport- oder Gütemodelle bezeichnet.

Die den numerischen Modellen unterliegenden Prozesse sind i.Allg. bekannt und über Laborversuche validiert. Auch die Optimierungen der numerischen Lösungsverfahren sind sehr weitgehend entwickelt (s. z.B. RUAN et al., 1999). Die Vor- und Nachteile der verschiedenen Methoden im Zusammenhang mit bestimmten Strömungs- und/oder Ausbreitungsszenarien sind publiziert (s. z.B. KINZELBACH, 1992).

Die Modellergebnisse und die auf ihrer Basis getroffenen Modellaussagen enthalten jedoch Unsicherheiten. Diese entstehen z.B. durch die Abstrahierung der natürlichen Verhältnisse auf der Grundlage von Daten, die i.d.R. an diskreten Punkten gewonnen werden. Durch die anschließende Abbildung dieser konzeptionellen Vorstellungen auf die Gitterstruktur des Modells (räumliches Strukturmodell, hydrogeologisches Modell²) entstehen zwangsläufig weitere nicht vermeidbare Auslegungsunsicherheiten über die tatsächlichen natürlichen Verhältnisse.

Da die Variabilität der für die Modellierung notwendigen Parameter in allen Skalenbereichen weder messtechnisch **vollständig** zu erfassen ist noch in ihrer Komplexität in derzeit verfügbaren Modellen abbildbar wäre, sind die daraus resultierenden Unsicherheiten als unvermeidbar anzusehen. Aber selbst die Erfassung der hydrogeologischen Gegebenheiten auf der **Modellskala** (charakterisiert durch den Gitterabstand der Berechnungspunkte) ist, nicht zuletzt aus finanziellen Gründen, nicht möglich, so dass durch die notwendig werdende Interpolation auf die nicht beprobten Modellbereiche zusammen mit den Skaleneffekten der Messmethoden weitere Unsicherheiten entstehen. Eine flächendeckende Ermittlung der Modellparameter wird bei deterministischen³ Modellen in der Regel anhand einer Kalibrierung des numerischen Modells, ohne weitere Betrachtung der Parameterunsicherheit, durchgeführt.

Die Unsicherheit der Modellparameter als Modelleingangsdaten pflanzt sich fort in die Modellergebnisse und führt zu einer ohne entsprechende Quantifizierung der Unsicherheit nicht abschätzbaren Minderung der Zuverlässigkeit der Modellprognosen. Zusätzlich können jedoch auch noch grundsätzlich vermeidbare Fehler infolge fachlich mangelhafter Verarbeitung der Daten hinzukommen.

Für die Beurteilung von Sanierungskonzeptionen spielt die Güte der Abbildung von Untergrundstrukturen, die den Transport von Schadstoffen prägen, eine ausschlaggebende Rolle. Ein Beispiel für die Auswirkung der Heterogenität des Untergrundes auf die Sanierungszeiten bzw. -kosten geben SCHÄFER & KINZELBACH (1991). Es wird gezeigt, dass bei allen hydraulischen Sanierungsmaßnahmen Inhomogenitäten in der Durchlässigkeitsverteilung zu einer Verlängerung der Maßnahme gegenüber dem homogenen Fall mit gleichen mittleren Eigenschaften führen. Aufgrund von bevorzugten Fließwegen können in einer bestimmten Zeitspanne gut durchlässige Bereiche eventuell schon mehrfach durchspült worden sein, während schlechter durchlässige Schlufflinsen noch nicht von der Maßnahme erfasst worden sind oder vielleicht sogar nie erfasst werden. Dies verdeutlicht Abbildung 1-1. Bei

2. im Sinne von FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE (1999).

3. Unter einem deterministischen Modell soll hier ein Modell verstanden werden, das Eingabegrößen verwendet, die als vollständig bekannt vorausgesetzt werden und als Ausgabe eine einzige, bestimmte deterministische Lösung liefert. Siehe auch Abschnitt D.6 im Anhang Seite 226.

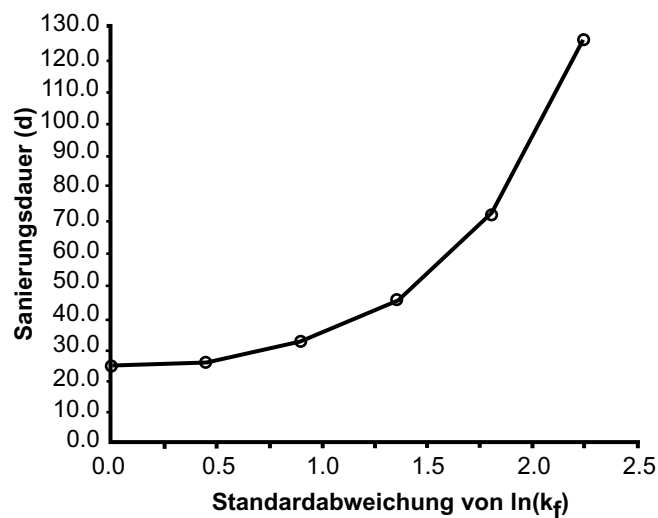


Abbildung 1-1: Abhängigkeit der Sanierungszeit von der Heterogenität des Untergrundes in einem synthetischen Beispielfall (DVWK, 1991)

einer Standardabweichung (als Maß für die Heterogenität des Untergrundes) von z.B. 1.8 wird die Sanierungszeit gegenüber dem homogenen Vergleichsfall mehr als verdreifacht. Ähnlich ist die Aussage in DVWK (1991), wo die Abhängigkeit der Sanierungskosten von der mittleren Transmissivität gezeigt wird (Abbildung 1-2). Zukünftig wird sicher auch im Rahmen von Qualitätssicherungsmaßnahmen die Angabe der Qualität von Modellergebnissen eine besondere Bedeutung erlangen (z.B. FORKEL, 2000).

Als Methode zur Behandlung der mit der nicht erfassbaren und nicht abbildbaren Variabilität der Untergrundeigenschaften zusammenhängenden Probleme haben sich probabilistisch orientierte Ansätze durchgesetzt. Diese berücksichtigen sowohl die beste Schätzung für die oben angesprochenen Eingabeparameter (Minimierung der Eingabedatenunsicherheit) als auch eine Quantifizierung der Unsicherheiten in den Modellergebnissen. In die endgültige Konzeption einer Sanierungsmaßnahme müssen dann

- die Modell-Prognose,
- ihre berechnete Unsicherheit und
- das angestrebte Sanierungsziel eingehen.

Verschiedene Konzeptionen können verglichen werden, und bei der Entscheidung kann damit auch die Sicherheit für das Erreichen vorgegebener Sanierungsziele eingehen.

Typ von Schadstoff- fahne und Aquifer Entwurfsparameter	Erkundung (I)	Entwurf (I)	Brunnen / Dränagen (I)	Infrastruktur/ Oberfläche (I)	Wasserbehandlung (I)	Brunnen / Dränagen (B)	Wasserbehandlung (B)	Überwachung (B)	gesamte Investitionskosten	gesamte Betriebskosten pro Jahr
Hoher Abfluß, hohe Transmis. (100 000 gal/day/ft.)										
Fahnenbreite · länge · tiefe (ft.)										
-250 · 500 · 25; 2Br; 2 gpm	83	28-110	16,5	39	33	16,5	5,5	11	196-281	33
-250 · 500 · 250; 2Br; 2 gpm	165	28-110	55	39	33	22	5,5	11	320-402	39
-2500 · 5000 · 25; 2Br; 20 gpm	220	28-110	16,5	165	44	16,5	5,5	11	474-557	33
-2500 · 5000 · 250; 2Br; 20 gpm	441	28-110	66	165	44	22	5,5	11	744-827	38
Hoher Abfluß, geringe Transmis. (5 000 gal/day/ft.)										
Fahnenbreite · länge · tiefe (ft.)										
-250 · 500 · 25; 4Br; 40 gpm	83	28-110	33	39	55	16,5	16,5	11	237-320	44
-250 · 500 · 250; 4Br; 40 gpm	165	28-110	121	39	55	22	16,5	11	406-490	50
-2500 · 5000 · 250; 4Br; 400 gpm	441	28-110	143	165	121	50	55	11	900 - 961	116

(I) = Investitionskosten (B) = Betriebskosten pro Jahr

Kosten in 1000 US\$

Kostenbasis 1985

Lundy und Mahan, 1982

1 gal/day/ft = $1,437 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

1 ft = 0,3048 m

1 gpm = 0,0631 l/s

Br. - Brunnen

Abbildung 1-2: Sanierungskosten in einem synthetischen Beispielfall in Abhängigkeit von Gebietsgröße und Durchlässigkeit des Mediums (aus DVWK, 1991, nach EPA, 1985)

1.2 Zielsetzung

Mit den in der Praxis üblicherweise verwendeten deterministischen Modellansätzen kann die Unsicherheit in den Modellparametern, in den Randbedingungen, sowie in den Modellergebnissen nicht quantifiziert werden. Um den in der Problemstellung genannten Ansprüchen gerecht werden zu können, muss zusätzlich eine statistische Komponente der Modelllösung bereitgestellt werden. Dies bedeutet, dass die (Modell-)Prognosesicherheit quantifizierbar und maximierbar sein muss.

In den letzten Jahrzehnten wurden umfangreiche Forschungsanstrengungen zur Integration der Heterogenität der hydrogeologischen Eigenschaften von Porenaquiferen und dem daraus resultierenden Unsicherheitsaspekt in numerische Grundwasserströmungs- und -transportmodelle unternommen (s. z.B. ESSAID & HESS, 1993;

SHRESTHA & LOGANATHAN, 1994; JAMES & OLDENBURG, 1997; HASSAN et al., 1997; SOUTTER & MUSY, 1998).

Hauptsächlich untersuchte Parameter sind neben der hydraulischen Durchlässigkeit (alternativ die Transmissivität oder Permeabilität) die Gesamtporosität und die effektive (durchflußwirksame) Porosität. Im Zusammenhang mit Fragestellungen der Grundwassersanierung sind die Arbeiten von WAGNER & GORELICK (1989), BHATT (1993), JAMES & GORELICK (1994) und RAUBER et al. (1998) zu nennen.

In der Mehrzahl der verfügbaren Veröffentlichungen werden keine realen Randbedingungen für den Einsatz stochastischer Methoden im Zusammenhang mit numerischen Modellierungen verwendet. Es werden vielmehr oft 'synthetische', vereinfachte Aquifere zugrundegelegt, an denen die Vorteile bestimmter Methoden demonstriert werden (z.B. CAPILLA et al., 1997; ZIMMERMAN et al., 1998; COPTY & FINDIKAKIS, 2000). Es fehlt daneben generell eine Darstellung des Nutzensgewinns der Methoden gegenüber der einfacher zu handhabenden deterministischen Vorgehensweise.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die verschiedenen Möglichkeiten aufzuzeigen, eine probabilistische Komponente in die mathematisch-numerische Modellierung mit Bezug zu Sanierungsplanungen zu integrieren. Es sollen geeignete Methoden in Abhängigkeit von Skala und Untergundheterogenität identifiziert werden, um in tatsächlichen praktischen Anwendungsfällen der Grundwassermodellierung mit komplexen Randbedingungen mit vertretbarem Aufwand Aussagen sowohl zur Sicherheit der Eingangsdaten als auch über die Sicherheit der Modellergebnisse treffen zu können. Dies geschieht hier anhand konkreter Beispielfälle von Sanierungen, wobei die Ergebnisse von Tracerversuchen bzw. die während der Sanierung selbst gemessenen Schadstoffkonzentrationen verwendet werden. Die vor dem Hintergrund konkreter Projekte durchgeführten Versuche werden hier als wissenschaftliche Experimente betrachtet und entsprechend verwertet.

Der Schwerpunkt der Arbeit liegt aber eindeutig in den Verfahren zur Überführung der geologischen bzw. hydrogeologischen Gegebenheiten in ein numerisches Modell und den daraus resultierenden Unsicherheiten in den Modellergebnissen. Der Aspekt der Beurteilung der Sicherheit eines Sanierungserfolges müsste darauf folgend betrachtet werden, ist aber nicht Gegenstand dieser Arbeit.

1.3 Vorgehen

Die hier verwendeten Ansätze für die Konzeption und Durchführung von hydraulischen Sanierungsmaßnahmen führen drei grundlegende Aspekte zusammen:

- mathematisch-numerische Modelle, die die Grundwasserströmung und den Transport von Schadstoffen berechnen und deren Ergebnisse so aufbereitet werden, dass zusätzliche Informationen zur Aussagesicherheit der Modelle bereitgestellt werden,
- eine probabilistische hydrogeologische Beschreibung eines Standorts, die Informationen über räumliche Korrelationen enthält,

- Schaffung von Möglichkeiten zur Einbeziehung sämtlicher vorhandener Informationen bei der hydrogeologischen Beschreibung des Standorts.

Die Methoden und Konzepte, die hierbei eingesetzt werden sind die folgenden:

Geostatistische Analysemethoden: Diese dienen der Ermittlung der räumlichen Korrelationen von Daten, wie z.B. der hydraulischen Durchlässigkeiten (k_f -Werte), auf der Grundlage geostatistischer Annahmen (Stationarität 2. Ordnung und Ergodizität). Die Methoden stellen die Basis-Parameter für geostatistische Interpolationen und Simulationen zur Verfügung. Eine Erläuterung der Methoden ist in Abschnitt 2.4.2 zu finden.

Geostatistische (Stochastische) Simulationen: Diese generieren eine k_f -Verteilung auf der Grundlage geostatistischer Parameter. Die Methoden sollen die Unsicherheit in der k_f -Verteilung berücksichtigen, indem gleichwahrscheinliche Simulationen mit einem geostatistischen Parametersatz generiert werden. Näheres hierzu in Abschnitt 2.4.4.

Integration deterministischer Elemente: Hiermit soll der Einfluss von Untergrundstrukturen erfasst werden, der in den stochastischen Simulationen nicht berücksichtigt werden kann. Hierzu gehören z.B. großräumige Trends sowie Expertenwissen, das sonst nicht in die formale mathematische Bearbeitung eingeht. Diese Elemente können in den stochastischen Simulationen integriert werden oder vice versa. Grundsätzliche Erläuterungen hierzu in Abschnitt 2.7.3.

Mathematisch-numerische Grundwassermodelle: Hiermit werden Grundwasserstände bzw. -konzentrationen von Wasserinhaltsstoffen auf der Grundlage von Eingangsdaten mit unterschiedlicher Sicherheit ermittelt. Die Modelle stellen formal gesehen die Transferfunktionen dar, durch die die Unsicherheiten propagiert werden. Als unsichere Eingangsdaten werden in dieser Arbeit v.a. die hydraulischen Durchlässigkeiten angesehen, da deren Größe und räumliche Verteilung den stärksten Einfluss auf die Ausbreitung eines Wasserinhaltsstoffes besitzt.

SUFIX: Hiermit wird eine Methode der inversen Parameterbestimmung auf der Grundlage des *Bayes' Sequential Updating* bezeichnet. Sie bietet die Möglichkeit, die Unsicherheiten der Eingangsdaten zu minimieren und die Unsicherheit der Modellergebnisse zu quantifizieren. Weiterhin können hoch unsichere, aber zahlreich vorhandene Daten (*soft data*) in die numerische Modellierung integriert werden. Im Gegensatz zu den analytischen Methoden zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten basiert dieses Verfahren auf der Monte-Carlo Methode und erweitert sie um das *Bayes' sequential updating* zur Reduzierung der Parameter-Unsicherheit. Analytische Verfahren werden hier nicht betrachtet, da sie aufgrund ihrer Einschränkungen wie z.B. Linearisierung der Modellgleichungen und Beschränkung des Heterogenitätsgrades (Varianz der Durchlässigkeit) und der eingeschränkten Wahl der Randbedingungen für praktische Anwendungen nur bedingt geeignet sind. Die SUFIX-Methode mit den hier erprobten Erweiterungen wird in Abschnitt 2.7.1 vorgestellt.

Numerische Modelle stehen im Mittelpunkt dieser Untersuchungen, da sie oft für die Analyse und Planung von standortspezifischen Sanierungsmaßnahmen bei der Kontamination von Böden und Grundwasser eingesetzt werden und sich dort bewährt haben (s. z.B. RABIDEAU & MILLER, 1994; BERGLUND, 1997; WANG & ZENG, 1997; BEAR & SUN, 1998; RAUBER et al., 1998).

Wird eine Kalibrierung des numerischen Modells als nicht ausreichend angesehen, können zusätzliche Daten i.d.R. eine größere Zuverlässigkeit der Prognoseausagen bewirken. Weitere Erkundungen führen jedoch zu höheren Kosten. Um den in Abbildung 1-3 dargestellten Punkt der optimalen Kosten, zu dem der Erkundungsstand der 'optimalen Kenntnisse' gehört, möglichst tief zu halten, kann versucht werden, ergänzend zur weiteren Datenbeschaffung von sog. 'harten Daten' (*hard data*) aus bereits vorhandenen 'weichen Daten' (*soft data*) zusätzliche Informationen zu gewinnen (s. z.B. ZHU & JOURNEL, 1992; DALY & VERLY, 1994; DIETRICH & FECHNER, 1995).

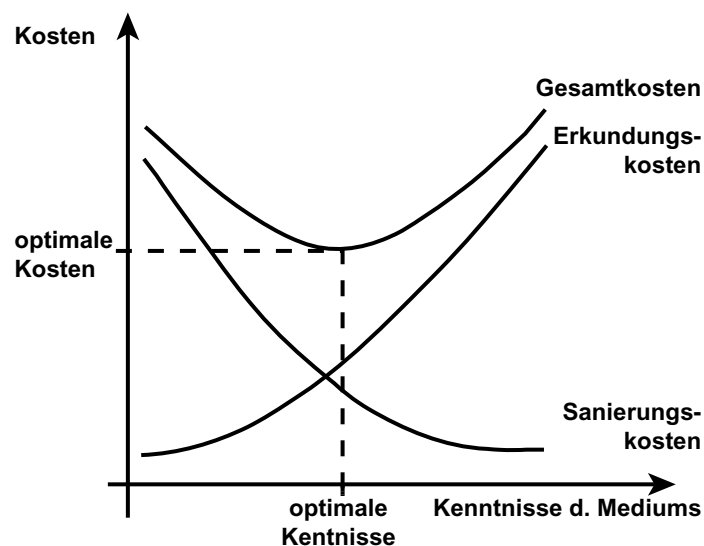


Abbildung 1-3: Schematische Darstellung des Kostenverhaltens (aus DVWK, 1991).

In den hier vorgestellten Untersuchungen werden als zuverlässige, harte Daten angesehen:

- hydraulische Untergrunddurchlässigkeiten (k_f -Werte), die aus einem Tracer-Versuch über Transportzeiten und Gefälleverhältnisse abgeleitet wurden,
- die Ergebnisse von Pumpversuchen,
- Grundwasserstandsmessungen,
- Konzentrationsmesswerte von Tracern und organischen Lösungsmitteln. Letztere stammen aus Untersuchungen im Zusammenhang mit Sanierungsplanungen.

Vor allem Konzentrationsmesswerte können jedoch hohe Messfehler infolge fehlerhafter Probenahme- und/oder Analysemethoden beinhalten, so dass hier der Übergang zu den *soft data* durchaus als fließend angesehen werden kann.

Als zusätzliche Informationen, die aber mit einer relativ hohen Unsicherheit behaftet sind (*soft data*), werden

- auf der Grundlage von Bohransprachen abgeschätzte Durchlässigkeitswerte und
- k_f -Werte, die aus Siebanalysen über Regressionsbeziehungen abgeleitet wurden,

als verwendbar betrachtet.

Erst durch einen integrierten Ansatz zur Berücksichtigung sämtlicher verfügbarer Daten wird eine optimierte Bestimmung des Parametersatzes, der zu den beobachteten Messungen führt, möglich. Abbildung 1-4 zeigt, dass auch aus Kostengründen eine Einbeziehung sämtlicher verfügbarer Daten in eine integrierte Betrachtung geboten erscheint. ANDERSSON & DESTOUNI (2001) erweitern diese Betrachtung auf den Zusammenhang zwischen Risiko (Wahrscheinlichkeit des Überschreitens eines vorgegebenen Grenzwertes) und den dafür notwendigen Kosten.

Durch die Kombination von stochastischen und deterministischen Ansätzen soll ein Optimum der Informationsverwertung und eine Minimierung der Prognoseunsicherheit erreicht werden. Die Abfolge und Verknüpfung der einzelnen Bearbeitungsschritte für alle hier eingesetzten Verfahren ist in Abbildung 1-5 zusammengefasst dargestellt. In dieser Arbeit sollen geeignete und generell verwendbare **Werkzeuge** zur Konzeption von hydraulischen Sanierungen auf der Grundlage von Aussagen, die aus Ergebnissen numerischer Modelle gewonnen werden, auf ihre Eignung für praktische Anwendungsfälle hin untersucht werden. Um diese Methoden für einen kommerziellen Einsatz verwendbar zu machen, wird sicher vor allem auf eine weitgehende Automatisierung der Abläufe Wert zu legen sein. Hierzu gehört z.B. die Bereitstellung geeigneter Software-Schnittstellen und übergeordneter Steuerprogramme mit grafischer Benutzeroberfläche.

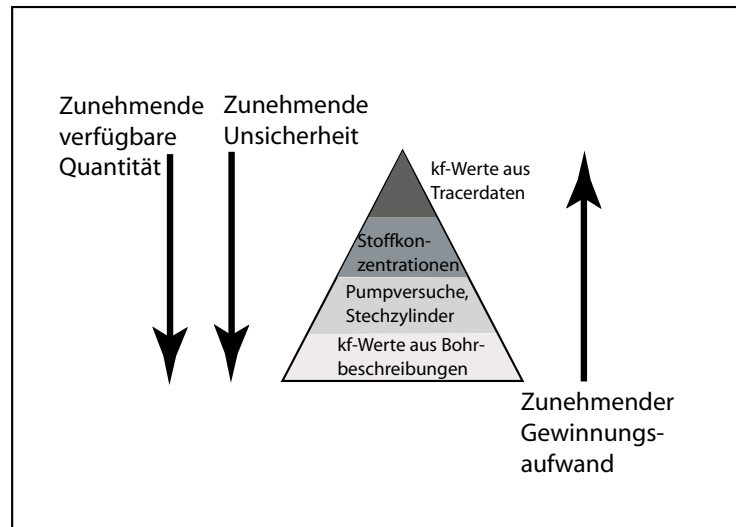


Abbildung 1-4: Beziehung zwischen Quantität der Modell-Grunddaten, deren Beschaffungsaufwand und der darin inhärent vorhandenen Unsicherheit

Der Aspekt der **Optimierung** der Sanierungsplanung (z.B. Anordnung und Auslegung der Abschöpfbrunnen) ist sehr stark abhängig von den jeweiligen Randbedingungen und Restriktionen eines tatsächlichen Standorts und kann als nächste Bearbeitungsstufe, die auf den hier verwendeten Methoden aufbaut, verstanden werden.

Die bisher weitgehend eingesetzten inversen Methoden verwenden eine manuell zonierte Beschreibung der räumlichen Heterogenität statt eines räumlichen Zufallsmodells und berücksichtigen demzufolge keine räumlichen Korrelationen in den Untergrundstrukturen. Formal gesehen ist das in dieser Arbeit konzipierte und verwendete Verfahren als inverses Lösungsverfahren auf einer geostatistischen Grundlage einzuordnen (s. z.B. McLAUGHLIN & TOWNLEY, 1996). Weiterhin kann man zusammenfassend feststellen, dass die Unterscheidung zu den bisherigen Ansätzen vor allem darin liegt, dass hier versucht wird, die Fortpflanzung der Unsicherheit von den Eingangsdaten (*soft data*) bis zum *updating*-Prozess dieser Daten in einem Propagationpfad integriert zu betrachten.

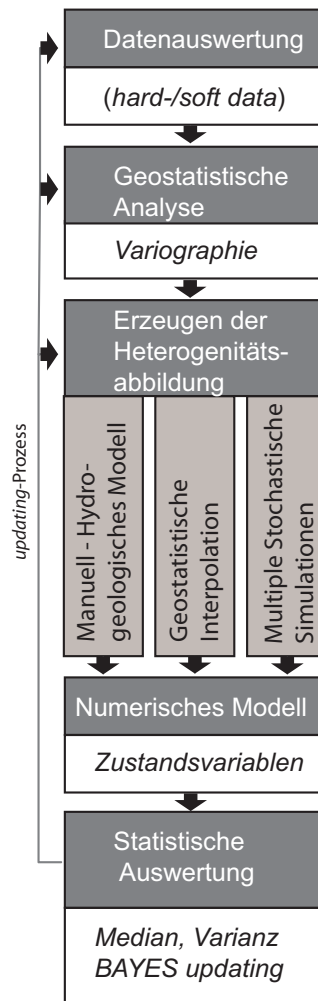


Abbildung 1-5: Schema des Bearbeitungsablaufs für eine numerische Modellierung unter Einbeziehung von Unsicherheitsaspekten

2 Die Unsicherheit in den Ergebnissen von Grundwassermodellen

Dieses Kapitel behandelt die grundlegenden Aspekte einer Unsicherheitsbetrachtung im Zusammenhang mit der Anwendung numerischer Grundwassermodelle und die daran angepassten Methoden zur Quantifizierung der Prognoseunsicherheit.

Abschnitt 2.1 gibt zuerst eine Zusammenfassung der verschiedenen Ursachen für die Unsicherheit in den Ergebnissen mathematischer Modelle, um dann in den folgenden Abschnitten näher auf die identifizierten Ursachen einzugehen. Im Abschnitt 2.2 wird die Heterogenität des Untergrundes und die damit zusammenhängende Problematik der repräsentativen Datenbeschaffung für die Untergrundkennwerte sowie der relevanten Modellparameter für die Transportmodellierung als maßgebende Ursache näher beleuchtet. Auch die Rückwirkung der Heterogenität auf die Planung und Durchführung von Sanierungen wird hier angesprochen. Anschließend befasst sich Abschnitt 2.3 mit der Verwendung dieser Daten in einem hydrogeologischen Modell, das als Vorstufe eines numerischen Modells anzusehen ist. Abschnitt 2.4 behandelt die mathematischen Ansätze zur Beschreibung der Heterogenität des Untergrundes auf einer stochastischen Grundlage und deren Verknüpfung mit den traditionellen Konzepten der Hydrogeologie. Abschnitt 2.5 zeigt die Stellung des numerischen Grundwassermodells als Transferfunktion zwischen der Erkundung und der Prognoseerstellung als Endziel einer Standortuntersuchung auf. Anschließend beschreibt Abschnitt 2.6 die Möglichkeiten der Lösung der mathematischen Gleichungen des Grundwassermodells, die in einem stochastischen Rahmen formuliert wurden. Aus den Lösungen der Gleichung ergibt sich unmittelbar eine Quantifizierung der Unsicherheit der Modellergebnisse. Im letzten Abschnitt des Kapitels (2.7) werden die Ergebnisse der vorhergehenden Abschnitte zu einem praxisgeeigneten Konzept für die Ermittlung der Prognoseunsicherheiten mittels numerischer Modelle zusammengefasst.

2.1 Allgemeines

Bei EHLSCHLAEGER (1998) ist der Begriff der Anwendungsunsicherheit (*application uncertainty*) zu finden. Diese teilt sich dort auf in die Unsicherheit der Eingangsdaten und die Prozessmodell-Unsicherheit. Diese Unterscheidung wird auch hier verwendet. Entsprechend werden in Tabelle 2-1 die Ursachen für unsichere Modellprognosen in die Bereiche 'Datengrundlage' und 'Modellanwendung' getrennt.

Tabelle 2-1: Ursachen für unsichere Modellprognosen

... in der Datengrundlage (Modellparameter und Randbedingungen)	Kennziffer
- Charakterisierung der natürlichen Heterogenität bzw. Variabilität von physikalischen, chemischen und biologischen Parametern auf der Grundlage von Punktmessungen in Raum und Zeit --> Eine Probe repräsentiert ein zu kleines Volumen (support)	D1
- Vernachlässigen von räumlichen und/oder zeitlichen Korrelationen in den Untergrundstrukturen --> Die Interpolation berücksichtigt nicht deterministische Strukturen und die Genese der Formation	D2
- Zusammenfassung von Daten verschiedenen Typs (objektiv/subjektiv bzw. <i>hard-/soft data</i>) bei der Bestimmung von Modellparametern --> Die Vertrauenswürdigkeit des Datensatzes kann nicht adäquat angegeben werden	D3
- Fortpflanzung von Fehlern und Unsicherheiten im Modellierungsprozess --> Eine Unsicherheitsbetrachtung muss am Beginn des Modellierungsprozesses ansetzen.	D4
- Messfehler --> Eine Folge des Messverfahrens oder der Messapparatur.	D5
... in der Modellkonzeption	
- ungenügende Beschreibung der Prozesse und Wechselwirkungen im hydrogeologischen und mathematischen Modell	
- unzureichende numerische Diskretisierung der räumlichen und zeitlichen Variabilität im numerischen Modell	
- unzureichende Beschreibung des Systemzustandes	
- der Modellierer selbst	

Die Verwendung der Begriffe 'Unsicherheit' und 'Fehler' geschieht ebenfalls in Anlehnung an EHLSCHLAEGGER (1998), der einen Fehler als messbar ansieht, im Unterschied zur Unsicherheit, die nur abgeschätzt werden kann.

Bei der Modellierung von Stoffausbreitungsvorgängen im Grundwasser stellt die Heterogenität des Grundwasserleiters eine herausragende und zu berücksichtigende Eigenheit dar. Die Heterogenität der hydraulischen Eigenschaften beeinflusst den Transport auf allen Raumskalen und bewirkt in der Regel eine Vergrößerung des kontaminierten Gebietes im Vergleich zu homogenen Medien.

Durch Beprobung können jedoch nur punktuelle Werte für die maßgebenden Modellparameter ermittelt werden, so dass die Kenntnis über die tatsächliche Heterogenität immer unvollständig bleiben muss. Diese Unsicherheit in der Beprobung wird auch als *sampling error*⁴ bezeichnet. Siehe hierzu auch Abschnitt 2.2.1 auf Seite 14. Damit verbunden ist das Problem der Ermittlung topologischer Zusammenhänge in der Struktur des Untergrundes. Dies bedeutet, dass die Erstreckung und Mächtigkeit von Strömung und Transport beeinflussenden Strukturen wie Hydrofazien⁵ nur abgeschätzt werden können (D2). Die integrierte Betrachtung von objektiven und subjektiven Daten (oder *hard* und *soft data*) kann problematisch sein, wenn

4. Kennziffer D1 in Tabelle 2-1

der unsichere Charakter von subjektiven Daten bzw. *soft data* nicht genügend berücksichtigt wird (D3). Fehler bzw. Unsicherheiten können sich im Verlauf des Modellierungsprozesses fortpflanzen. Die Unsicherheit von Modell-Eingangsdaten muss bereits am Anfang der Kette in Betracht gezogen werden (D4). Eine weitere bedeutsame Quelle von Prognoseunsicherheiten können die Unsicherheiten bzw. Fehler in den Messungen darstellen (*measurement error*, D5). Damit sind die Ergebnisse von Modellrechnungen generell mit Unsicherheiten behaftet.

Aber selbst wenn alle Modelleingangsdaten 'sicher' bekannt wären, verbliebe dennoch in den Modellergebnissen eine Unsicherheit, die durch die Konzeption eines mathematisch-numerischen Modells als Versuch der Reproduktion von Vorgängen in der Natur bedingt ist (untere Hälfte in Tabelle 2-1). Dieser Bereich der Ursachen für Unsicherheiten in den Modellprognosen ist getrennt von dem vorher beschriebenen Ursachenbereich zu sehen und wird hier nicht weiter betrachtet werden, da dies den Rahmen dieser Arbeit deutlich sprengen würde. Entsprechende Ausarbeitungen zum Einfluss des numerischen Verfahrens auf die Ergebnisse der Transportmodellierung sind z.B. bei KINZELBACH (1992) zu finden. Eine gewisse Interaktion mit dem erstgenannten Block der Unsicherheiten besteht jedoch insofern, als natürlich nur die Prozesse und Wechselwirkungen modelliert werden können, für die auch Daten verfügbar sind.

Festzuhalten bleibt weiterhin, dass streng genommen keine Unsicherheiten in den Modell**prognosen** ermittelt werden können, sondern nur die Unsicherheiten, die bei der **Kalibrierung** und Validierung des Modells ermittelt wurden, auf die Prognoserechnungen transferiert werden können. Prognosen sind Abläufe, in denen die zukünftig erwarteten Bedingungen in Form von Szenarien erfasst werden. Zwar können hierfür die Randbedingungen exakt festgelegt werden, die Eintrittswahrscheinlichkeit der dahinter liegenden Annahmen ist jedoch in der Regel nicht quantifizierbar. In FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE (1999) wird deshalb die Ausweisung von Unsicherheiten und Informationsdefiziten richtigerweise zum Bereich Modellprüfung gezählt und nicht zur Modellanwendung.

Die in der Kalibrierung und Modellprüfung gewonnenen Erkenntnisse werden aber erarbeitet, um sie auf Prognosen mit vom Kalibrierungszustand abweichenden Randbedingungen anzuwenden. Um dies tun zu können, werden in dieser Arbeit die gleichen Voraussetzungen für eine Prognoseaussage auf Grundlage von Modellrechnungen gesehen, wie sie im Allgemeinen auch für die deterministische Modellierung als maßgebend angesehen werden. Die prognostizierten Zustände dürfen also nicht soweit von den Kalibrierungszuständen abweichen, dass die ermittelten Gültigkeitsgrenzen für die Modellparameter nicht mehr gewahrt bleiben. So kann z.B. eine Unsicherheitsanalyse auf der Basis der Annahme vollständiger Löslichkeit des Schadstoffs in Wasser nicht für Prognosen eingesetzt werden, in denen Mehrphasentransport maßgebend sein wird.

5. hier: Zusammenhängende Einheiten ähnlicher Eigenschaften in Bezug auf Strömung und Transport

2.2 Unsicherheiten bei der Erkundung kontaminierter Standorte

Die Ergebnisse der Erkundung sind die Grundlage für eine numerische Modellierung des Stofftransports im Grundwasser. Die Erkundung muss also die Daten bereitstellen, die für eine zuverlässige Charakterisierung des Transports notwendig sind. Erfasst werden müssen die folgenden Bedingungen:

- A. Die Heterogenität des Untergrundes bezüglich seiner physikalischen, chemischen und biologischen Eigenschaften.
- B. Die Topologie des Untergrundes. Darunter sind Informationen über den Zusammenhang von Bereichen mit ähnlichen Eigenschaften zu verstehen, da die Heterogenität nicht rein zufällig strukturiert ist, sondern über gewisse Entfernungen korreliert ist.
- C. Die Eigenschaften der im Wasser gelösten Stoffe selbst.
- D. Anfangs- und Randbedingungen, wie Quellstärke und Erstreckung der Fahne.

Alle diese Eigenschaften sind örtlich variabel, darüberhinaus können sich die chemischen Eigenschaften auch zeitlich ändern. Der Grad der Variabilität der Eigenschaften bzw. die Heterogenität⁶ der sich daraus ergebenden Strukturen muss immer im Zusammenhang mit der Skala gesehen werden, auf der die Messungen stattfinden. Im Hinblick auf die Unsicherheiten der Modellierung ist die Frage von Bedeutung, ob die **Messskala** der **Prozessskala** entspricht, die zur Beschreibung der modellierten Prozesse notwendig ist und auf der die Prozesse mit mathematischen Modellen beschrieben werden können. Anhaltspunkte hierfür gibt Tabelle 2-2. Das für die Berechnung der Strömung verwendete *Darcy*-Gesetz gilt von der Labor- bis zur Regionalskala. Bei Berechnungen auf der Regionalskala hat der k_f -Wert jedoch die Bedeutung eines effektiven (über einen Aggregierungsprozess gewonnenen) Parameters. Punktmessungen sind demnach hier nicht mehr geeignet zur repräsentativen Beschreibung der Untergrunddurchlässigkeit. Alternativ kann auch die Verteilung dieses Parameters mittels stochastischer Methoden vorgenommen werden, wie dies in dieser Arbeit in mehreren Szenarien durchgeführt wird. Demnach ist es also möglich, die Skalen für die Prozesse, für die Messung und die Modellierung mit geeigneten Verfahren in Einklang zu bringen.

2.2.1 Die natürliche Heterogenität des Untergrundes

Natürliche geologische Prozesse, die während der Entstehung des Aquifers abliefen, und nachfolgende chemische, physikalische und biologische Prozesse führen zu einer Vielzahl von verschiedenen Skalen. Der Untergrund ist auf allen diesen Skalen inhärent heterogen. Die Skalenunterteilung und ihre Bezeichnungen differieren in der Hydrologie und Hydrogeologie jedoch sehr stark. In dieser Arbeit

6. Def. Duden: *aus ungleichartigem zusammengesetzt*.

werden die Definitionen Mikroskala, Makroskala und Regionalskala angelehnt an DURNER (1991) verwendet (s. Tabelle 2-2).

Tabelle 2-2: Skaleneinteilung nach DURNER (1991) und TIETJE (1993)

Skalenbezeichnung	typische Länge [m]	Modellgleichung (nach Tietje, 1993)
Mikroskala (Poren-)	$10^{-3} - 10^{-1}$	Navier-Stokes-Gleichungen
Makroskala (Labor-)	$10^0 - 10^1$	Darcy-Gesetz
Regionalskala	$10^2 - 10^4$	Effektive Parameter, Stochastische Modelle

Auf der Mikroskala enthalten Aquifere eine Mischung verschiedener Phasen: fest, flüssig und gasförmig, charakterisiert durch eine komplexe Geometrie. So können Heterogenitäten auf der Mikroskala z.B. die NAPL⁷- Migration und Rückhaltung beeinflussen, wobei hier vor allem auch die Korngrößenverteilung von besonderer Bedeutung ist (NATIONAL RESEARCH COUNCIL, 1994).

Großskalige Strukturen der hydraulischen Durchlässigkeit bestimmen die Fließpfade von Grundwasser und darin gelösten Stoffen, während sowohl groß- als auch kleinskalige Strukturen den Dispersionseffekt prägen (s. Abbildung 2-1 und KOLTERMANN & GORELICK, 1996). Großskalige Heterogenitäten können damit einen deutlichen Einfluss auf den Schadstofftransport ausüben. So sind z. B. in Sand und Kiesaquiferen häufig Lehm- und Tonlinsen als nichtleitende Strukturen eingelagert. Da sich Grundwasser in Lehm und Ton deutlich langsamer bewegt als im umgebenden Sand und Kies, ergibt sich eine deutliche Differenzierung der Ausbreitung in den unterschiedlichen Strukturelementen.

Die Heterogenität drückt sich auch in deutlichen Unterschieden der hydraulischen Durchlässigkeit aus. So ermittelte SUDICKY (1986) für einen als homogen angesprochenen Sand- und Kiesaquifer auf einer Skala von ca. 1000 m^2 k_f -Werte im Bereich zwischen 1×10^{-5} bis 2.1×10^{-4} m/s. Die geologischen Strukturen, die für diese Variabilität verantwortlich sind, lagen zwischen einer Skala von ein paar Zentimetern bis zu einigen Zehner Zentimetern in der Vertikalen und zwischen einem und wenigen Metern in der Horizontalen. Wegen der großskaligen Heterogenitäten ist die 'Verschmierung' der Ausbreitungsfahne von gelösten Schadstoffen auf der Feldskala größer, als dies durch Laborversuchsergebnisse vorhergesagt wird. Es wird daraus geschlossen, dass für eine zuverlässige, 'genaue' Vorhersage des Transports von Schadstoffen für einen spezifischen Standort eine detaillierte Beschreibung der hydraulischen Aquifereigenschaften auf der Skala von 10 bis 100 cm notwendig ist.

Ein Beispiel für die Komplexität einer Fahne geben die Untersuchungen in Cape Cod, MA., wo 650 *Multilevel sampler* niedergebracht wurden (HESS et al., 1992). Linsen und Zonen geringer Durchlässigkeit führen zu einem Massen-Transfer Ver-

7. Non Aqueous Phase Liquids, also mit Wasser nicht oder nur sehr gering mischbare Flüssigkeiten.

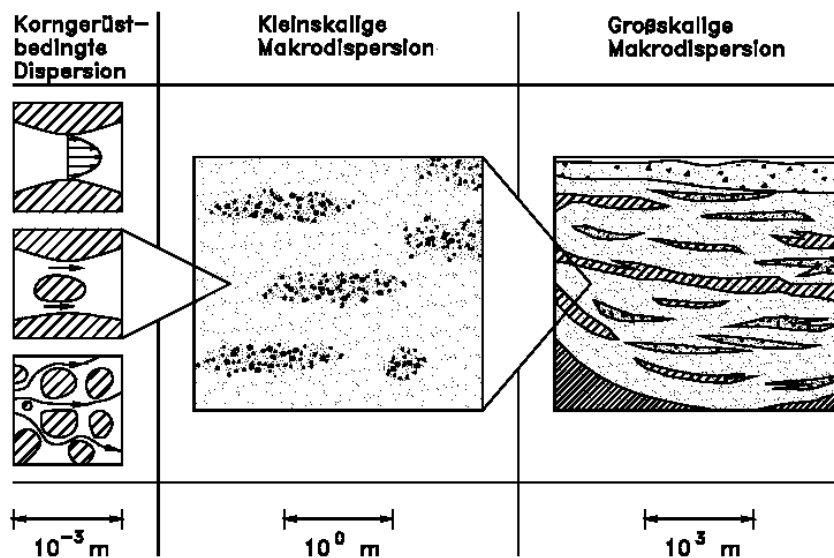


Abbildung 2-1: Skalen der dispersiven Stoffausbreitung (aus KINZELBACH, 1992)

halten ähnlich wie in aggregierten Böden. Diese Zonen verhalten sich wie Quellen und Senken für Schadstoffe. Die Zeiten zum Ausdiffundieren aus gering durchlässigen Zonen sind u.U. maßgebend für die Dauer einer hydraulischen Sanierung (NATIONAL RESEARCH COUNCIL, 1994).

Die Komplexität des Untergrundes beschneidet nicht nur die Aussagekraft von Modellen, sondern stellt auch ein beträchtliches Hindernis bei der Sanierung von Grundwasser-Schadensfällen dar. Das hydrogeologische Modell⁸ als Grundlage und Voraussetzung für ein Strömungs- bzw. Transportmodell muss deshalb die Komplexität des Untergrundes in angemessener Weise berücksichtigen. Die Komplexität, Heterogenität bzw. Variabilität des Untergrundes kann eine Sanierung (bzw. deren Zeitdauer oder sogar ihren Erfolg) beträchtlich beeinflussen. Wenn Kontaminanten sich im Untergrund bewegen, sind sie einer Vielzahl von physikalischen, chemischen und biologischen Prozessen ausgesetzt. Um eine wirksame Sanierung durchzuführen zu können, ist es notwendig, diese Prozesse zu verstehen, ihre Plausibilitätsgrenzen und die Spannweite der Parameter, mit denen sie mathematisch beschrieben werden, zu kennen. Die Problematik der Konzeption einer hydraulischen Sanierung in Abhängigkeit von unterschiedlichen Strukturszenarien des Untergrundes wird umfassend bei TOUSSAINT (1994) diskutiert.

Im Folgenden soll dargestellt werden, welche Auswirkungen die Untergrundheterogenität auf die Parametrisierung eines mathematischen Modells hat, d.h. wie sicher die Beschreibung der Heterogenität in Form eines Parametersatzes eines Modells ist. Dazu sollen in den folgenden drei Unterabschnitten die Verfahren der

8. Zur Definition s. Abschnitt 2.3 auf Seite 22.

Informationsgewinnung dargestellt, sowie Anmerkungen zur Sicherheit der jeweiligen Verfahren gemacht werden.

Den Prozess der Erstellung eines Parametersatzes kann man grob in drei aufeinanderfolgende Schritte einteilen:

- (1) Ermittlung der Grobstruktur des Aquifers,
- (2) Ermittlung der Zahlenwerte für die hydrogeologischen Kennwerte,
- (3) Kopplung der Strukturaufnahme aus Schritt 1 mit den Werten aus Schritt 2 in der modellspezifischen räumlichen Diskretisierung und Skala.

Ermittlung der hydrogeologisch wirksamen Struktur des Aquifers

Aquifere⁹ kann man grob in zwei Kategorien einteilen: konsolidierte und unkonsolidierte Aquifere. Unkonsolidierte Aquifere bestehen aus Lockergesteinen wie Sand und Kies. Wasser wird in den Poren zwischen den Körnern gespeichert und transportiert. Konsolidierte Aquifere werden aus mehr oder weniger klüftigem Gestein gebildet. Die Wasserspeicherung und der Wassertransport erfolgt hier vorwiegend in Klüften und Lösungshohlräumen. Über der gesättigten Bodenzone, in der sämtliche Hohlräume mit Wasser gefüllt sind, liegt in ungespannten Aquifern die ungesättigte oder vadosa Bodenzone.

Anhand von Bohrungen wird die Verteilung von hydrogeologisch wirksamen Strukturen mittels petrografischer Ansprache ermittelt. Typische Methoden sind hier:

- (a) Aufschlussbohrungen
- (b) Aufschlussgruben
- (c) Tomographie
- (d) Indikator-Geostatistik zur Auswertung

Ermittlung der Zahlenwerte für die hydrogeologischen Kennwerte

Die in Schritt 1 gefundenen Strukturen werden beschrieben mittels für die Strömung und den Transport relevanter hydrogeologischer Kennwerte. Wichtige Beispiele hierfür sind in Tabelle 2-3 zusammengefasst. Typische Verfahren zur Quantifizierung der hydrogeologischen Eigenschaften des Untergrundes sind:

- (a) Pumpversuche
- (b) Permeameterversuche
- (c) Tracerversuche
- (d) Regressionsauswertung der Kornsummenlinie

9. Der Begriff Aquifer wird im Folgenden gleichbedeutend mit Grundwasserleiter verwendet. Nach der in Deutschland gültigen Definition in DIN 4049-3 ist ein Grundwasserleiter ein Gesteinskörper, der geeignet ist Grundwasser weiterzuleiten, demnach also nicht zwingend wassererfüllt sein muss.

(e) Pedotransferfunktion als Zuordnungstabelle

Kopplung der Struktur mit den Werten der hydrogeologischen Parameter

Die Kopplung findet statt in der modellspezifischen räumlichen Diskretisierung und Skala. Dazu ist es in der Regel notwendig, die ermittelten hydrogeologischen Kennwerte auf diese Skala zu transformieren. Dies kann z.B. über einen *upscaling*-Prozess geschehen, wenn den Modellzonen jeweils ein gemittelter Parameterwert zugewiesen werden muss. Geschieht diese Mittelung nach bestimmten Vorgaben, spricht man von effektiven Parametern (s. z.B. GOMEZ-HERNANDEZ & GORELICK 1989; CHRYSIKOPOULOS, 1995).

In Tabelle 2-3 sind die wesentlichen hydraulischen Eigenschaften eines Aquifers, die gleichzeitig als physikalisch begründete Modellparameter eingesetzt werden können, mit ihrer Bedeutung im Hinblick auf eine hydraulische Sanierung zusammengefasst.

Tabelle 2-3: Durch eine Erkundung gewinnbare Parameter für eine numerische Modellierung der Grundwasserströmung und des Stofftransports

Eigenschaft	Beschreibung	Bedeutung für GW-Sanierung	Bedeutung für Unsicherheitsbetrachtung
Porosität n , bzw. effektive Porosität n_e	Volumen des Porenraumes relativ zum Gesamtvolumen, bzw. verbundener Porenraum, in dem Fluide transportiert werden.	Poren halten Wasser und Schadstoffe zurück, Wasser und Schadstoffe fließen durch verbundene Poren	eher gering, da Schwankung nur 0.1 bis 0.4
hydraulische Durchlässigkeit bzw. Leitfähigkeit k_f	Maß für den Fließwiderstand im Aquifer	beeinflusst die Entnahmerate des GW und vor allem die Fließgeschwindigkeit	sehr hoch
Residualsättigung	Anteil des gesamten Fluid-Volumens, das nach dem Entwässern eines ungespannten Aquifers zurückgehalten wird.	beeinflusst die Menge an Schadstoffen, die nach dem Pumpen im Aquifer verbleibt	hoch, da Sanierungszeit direkt beeinflusst wird.
Dispersivität	Aquifereigenschaft, ist abhängig von Lagerungsdichte, Korndurchmesser, Kornform und Ungleichförmigkeitsgrad des Aquifermaterials sowie von der Zeit. Führt zu einer mikroskopische Variabilität der Geschwindigkeit nach Betrag und Richtung in den Poren.	maßgebend für die 'Ver-smierung' einer Fahne im Untergrund.	mittel, da im Fehlerbereich einer Zehnerpotenz abschätzbar, hoch, wenn kleine Grenzkonzentrationen eingehalten werden müssen

Tabelle 2-4: Physikalische Umgebungsparameter, die den Stofftransport direkt beeinflussen.

Eigenschaft	Bedeutung für GW-Sanierung	Bedeutung für Unsicherheitsbetrachtung
Temperatur	Einfluss auf Viskosität, Transport in der Dampfphase, Wasserlöslichkeit (s. Tabelle 2-5).	in Mitteleuropa gering, da relativ konstante GW-Temperatur.
Porenverteilung	Rückhaltung von NAPL in Porenzwickeln.	nur bei Mehrphasenmodellen
Gehalt an organischem Kohlenstoff	Einfluss auf das Sorptionsverhalten der Wasserinhaltsstoffe	für 'worst-case' Betrachtung gering

Als hydraulische Eigenschaft mit der größten Bedeutung bei einer hydraulischen Sanierung ist die Größe der hydraulischen Durchlässigkeit und ihre räumliche Variabilität zu sehen (NATIONAL RESEARCH COUNCIL, 1994). Eine Schwankungsbreite von zwei Zehnerpotenzen innerhalb eines Lockergesteinsaquifers mit sandigen bzw. schluffigen Bereichen ist als üblich anzunehmen.

Da die Wassermenge, die einem Brunnen entnommen werden kann direkt von der hydraulischen Durchlässigkeit abhängt (*Darcy-Gesetz*), kann z.B. aus einem sandigen Aquifer potentiell eine hundertfach größere Menge an kontaminiertem Wasser entnommen werden, als aus einem schluffig sandigen Aquifer. Dieser Vorteil eines durchlässigen Aquifers wird aber zumindest teilweise wieder dadurch aufgehoben, dass naturgemäß hier der Kontaminationsbereich weiter ausgedehnt sein wird.

Der Einfluss der hydraulischen Durchlässigkeit auf den Erfolg einer hydraulischen Sanierung ist für einen klüftigen Grundwasserleiter sehr viel schwieriger vorherzusagen. Die hydraulischen Eigenschaften variieren hier im Raum sehr viel stärker und sind damit vor allem auch von dem erfassten Aquifervolumen abhängig. Schwierig ist daher die Angabe eines repräsentativen Elementarvolumens (REV). Kontaminanten bewegen sich bevorzugt entlang von Klüften, die gegenüber der umgebenden Matrix eine sehr viel höhere Durchlässigkeit aufweisen. Die Sanierung eines Kluftaquifers stellt daher eine besondere technische Herausforderung dar, der Erkundung kommt hier eine besondere Bedeutung zu (s. TOUSSAINT, 1994).

2.2.2 Bedeutung der Untergrundstrukturen für die Schadstoffausbreitung

Im Rahmen einer Unsicherheitsbetrachtung des Stofftransports im Grundwasser ist die Erfassung der Untergrundstrukturen von besonderer Bedeutung für die Ermittlung der Migrationswege eines 'Wasserteilchens' (advektiver Transport) sowie für die Bestimmung des dispersiven Anteils des Transports. Dem Phänomen der bevorzugten Fließwege, die durch eine Erkundung jedoch kaum gegenüber der Bodenmatrix abgrenzbar sind, kommt eine besondere Bedeutung zu. Bevorzugte Fließwege können für eine deutlich schnellere Stoffverlagerung sorgen, als dies auf

der Grundlage einer berechneten Abstandsgeschwindigkeit zu erwarten wäre. Kleinskalig können hierfür Makroporen verantwortlich sein, die vor allem in der ungesättigten Zone eine Rolle bei der raschen Tiefenverlagerung eines Stoffes spielen.

Für die Modellierung der gesättigten Zone sind jedoch größerskalige Strukturen von Bedeutung, wie z.B. Kiesrinnen, die aus zugeschütteten alten Flussläufen entstanden sein können (Paläorinnen).

Die tatsächlichen Migrationswege eines Stoffes hängen außer von den Untergrundstrukturen und deren physikalischen, chemischen und biologischen Eigenschaften auch von den Eigenschaften des Stoffs selbst ab. Die Abbildung der Struktur gibt also nur potentiell mögliche Migrationswege wieder.

Die drei wichtigsten Migrationswege für Schadstoffe sind:

- (1) Transport mit der *wässrigen Phase* innerhalb der Schadstoffahne
- (2) Transport in der *Dampfphase*
- (3) Transport als *NAPL* ('in Phase')

Weiter gehende Erläuterungen finden sich im Anhang (Abschnitt D.7 auf Seite 227).

2.2.3 Bedeutung der Stoffeigenschaften

Zu den Stoffen mit dem größten Gefährdungspotential gehören halogenierte Kohlenwasserstoffe (HKW). Die größte Bedeutung innerhalb dieser Gruppe hinsichtlich der Produktions- und Verbrauchsmengen, sowie in Bezug auf ihre Grundwasserrelevanz besitzen die chlorierten Kohlenwasserstoffe (CKW) und nachgeordnet auch einige Fluorkohlenwasserstoffe (FCKW) (TOUSSAINT, 1994). Typische Stoffe, die in der Mehrzahl der Sanierungen gefunden werden, sind dabei die als Lösungs- und Entfettungsmittel verwendeten Massenprodukte *Dichlormethan*, *1,1,1-Trichlorethan*, *Trichlorethen* (Tri) und *Tetrachlorethen* (Per). Die beiden letztgenannten Stoffe sind von wesentlicher Bedeutung für die Untersuchungen in der Fallstudie 2 (Kapitel 3)¹⁰.

In der Fallstudie 1 (Kapitel 2) liegt zwar eine Kontamination mit polyzyklisch aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAKs¹¹) vor, als Grundlage für die Transportmodellierungen werden jedoch die Tracerstoffe Bromid und Uranin herangezogen. Hier ist also zu berücksichtigen, dass die Unsicherheitsanalyse mit Stoffen erfolgt, die als vollständig löslich gelten, während für eine eventuelle Prognoseaussage für das Verhalten der PAKs - deren Löslichkeit in Wasser um etwa 4 Größenordnungen kleiner ist als die von CKWs - diese Annahme nur sehr eingeschränkt gelten kann.

Die spezifischen Eigenschaften der Schadstoffe werden in den Untersuchungen nicht berücksichtigt. Im Fall 1 handelt es sich bei dem modellierten Stoff um Bro-

10. Zu den stofflichen Eigenschaften von HKWs und ihren Transformationen und Abbauprodukten siehe TOUSSAINT (1994).

11. Polyzyklische Aromatische Kohlenwasserstoffe

mid, im Fall 2 um Tri und Per, wobei diese Stoffe als vollständig in Wasser gelöst angesehen werden. Nur mit speziellen numerischen Transportmodellen, wie z.B. RT3D (CLEMENT, 1997), können die stoffspezifischen Eigenschaften (wie Löslichkeit, Reaktion mit anderen Stoffen und Verbindungen) in einem mathematischen Modellansatz integriert betrachtet werden. Die Anzahl der als unsicher anzusehenden Parameter vergrößert sich beim Einsatz dieser Modelle um die physikalischen, biologischen und chemischen Umgebungsparameter aus Tabelle 2-4, wie z.B. um die Wassertemperatur, den Gehalt an organischem Kohlenstoff, usw.. Die Stoffeigenschaften selbst sind als sicher zu betrachten, unsicher sind die Verteilung und Größe der physikalischen, chemischen und biologischen Zustandsvariablen. Zur Vervollständigung der Betrachtung der Quellen der Unsicherheit in den Prognosen von Transportmodellen sollen nachstehend die wichtigsten zusammengefasst dargestellt werden. Die Bedeutung der spezifischen Schadstoffeigenschaften im Zusammenhang mit einer hydraulischen Sanierung und ihre Bedeutung für die Unsicherheitsanalyse gibt zusammengefasst Tabelle 2-5. Die Bedeutung für eine Unsicherheitsanalyse rührt aus der Tatsache, dass sehr oft bei einer hydraulischen Sanierung entweder nicht bekannt ist, welche Stoffe originär infiltriert wurden, wobei es sich oft auch um Abbauprodukte anderer Stoffe handeln kann, oder die Auswirkungen von Stoffgemischen auf diese Eigenschaften nicht sicher sind.

Tabelle 2-5: Wichtige Eigenschaften der mit dem Grundwasser transportierten Schadstoffe bei einer hydraulischen Sanierung

Eigenschaft	Bedeutung für die GW-Sanierung	Bedeutung für die Unsicherheitsanalyse
Löslichkeit	<ul style="list-style-type: none"> - beeinflusst die Menge an Schadstoff, die potentiell mit dem Grundwasser transportiert werden kann. - je besser die L., umso größere Erstreckung der Fahne, aber umso bessere Entfernung durch Abpumpen aus Untergrund möglich. 	hoch, maßgebend für konzeptionelle Vorstellung im hydrogeologischen Modell, Mehrphasentransport
Dichte	<ul style="list-style-type: none"> - beeinflusst Art der Sanierung: Abschöpfen, Pumpen, usw. - beeinflusst Erkundungsumfang: bei LNAPLs^a weiter Transport mit GW-Gradient, bei DNAPLs^b Bewegung auf der Sohle auch entgegen GW-Gradient. 	hoch, maßgebend für konzeptionelle Vorstellung im hydrogeologischen Modell, Dichteströmung
Zähigkeit (Viskosität)	<ul style="list-style-type: none"> - beeinflusst v.a. Restsättigung, Sanierungsdauer 	mittel,

a. Low-density Non-Aqueous Phase Liquids, besitzen eine Dichte $< 1\text{g/cm}^3$

b. Dense Non-Aqueous Phase Liquids, besitzen eine Dichte $> 1\text{g/cm}^3$

2.3 Beschreibung der Heterogenität des Untergrundes in einem Hydrogeologischen Modell

In einem hydrogeologischen Modell als konzeptionelle Vorstufe der Modellberechnungen werden alle verfügbaren Informationen über geologische, geophysikalische, geochemische und hydrologische Felduntersuchungen zusammengefasst und ausgewertet. Grundwassermodelle dienen der Klärung bzw. der Interpretation geohydraulischer Vorgänge. Um dies zu erreichen, muss vorausgesetzt werden, dass standortspezifische, realistische und in sich stimmige hydrogeologische Modellvorstellungen existieren. Als Umsetzung der komplexen geologischen und hydrogeologischen Gegebenheiten in ein vereinfachendes abstrahierendes Modell stellt das hydrogeologische Modell ein wichtiges Bindeglied zwischen der Datengrundlage und der eigentlichen numerischen Modellierung dar. Bedingt durch den Zwang zur **Vereinfachung** und **Abstrahierung** stellt dieser Schritt neben der **punktweisen Erhebung** der Datengrundlage für ein heterogenes Medium eine weitere Ursache für unsichere Ergebnisse von Modellrechnungen dar.

Nach FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE (1999) ist das Hydrogeologische Modell die Abstrahierung bzw. Schematisierung der Einflussgrößen und ihrer Zusammenhänge. Entsprechend den dort gemachten Vorgaben beinhaltet es die Darstellung der wesentlichen Systemeigenschaften (hydrogeologische Systemvorstellung, konzeptionelles Modell) im Untersuchungsraum für die Beschreibung und Prognose 'hydrogeologischer'¹² Vorgänge. Ziel ist die Erfassung der hydrogeologischen Systemeigenschaften, um über die gemessenen Wirkungen auf die Ursachen schließen zu können.

Unter dem Blickwinkel des Erfassens von Unsicherheitsquellen sind die folgenden Arbeitsschritte zur Erstellung eines Hydrogeologischen Modells zu erwähnen (DAGAN, 1997; FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE, 1999):

- (1) Festlegung der Grenzen des Untersuchungsgebietes, des Modellgebietes und des Bereiches, in dem Modellaussagen bzw. -prognosen getroffen werden sollen,
- (2) Erheben der systembestimmenden Kennwerte und Parameter aus den Bereichen Geologie, Hydrologie, Grundwasserwirtschaft, Wasserversorgung, usw.,
- (3) Identifizieren von geohydraulisch wirksamen geologischen Einheiten,
- (4) Festlegen von Grundwasserneubildungsgebieten und den zugehörigen Infiltrationsmengen,
- (5) Festlegen der geeigneten hydrologischen und hydrogeologischen Randbedingungen, die im Modell dann als mathematischen Randbedingungen umgesetzt werden: z.B. Festpotentiale oder vorgegebene Durchflüsse, jahreszeitliche Schwankungen von Einflussgrößen, Lage und Fördermengen von Brunnen,

12. Gemeint sind hier sicher geohydraulische bzw. Grundwasserströmungs-Vorgänge

- (6) Prüfen der hydrogeologischen Modellvorstellung und Modellgrößen auf Nachvollziehbarkeit und Quantifizierbarkeit des hydrogeologischen Konzeptes.

Der gesamte Modellbildungsprozess ist jedoch stark abhängig vom eigentlichen Ziel der Grundwassermodellierung. Ist man z.B. an einem lokalen Schadensfall interessiert, der sich etwa über eine Entfernung erstreckt, die der zehnfachen Aquifermächtigkeit entspricht, ist vor allem der lokale geologische Aufbau des Aquifers von Bedeutung. Wenn genügend Informationen über die lokalen Strömungsverhältnisse vorliegen (Grundwasserstände, hydraulische Durchlässigkeiten, evtl. Bodenkennwerte für die ungesättigte Strömung, usw.), sind die Bedingungen an einem entfernt liegenden Rand des Untersuchungsgebietes nur von nachrangigem Interesse. Bei Modellierungen der Stoffausbreitung sind darüberhinaus in vielen Fällen zusätzliche Annahmen erforderlich, da z.B. die 'Quellstärke' einer Verschmutzung nur in seltenen Fällen einigermaßen verlässlich bekannt ist. Für die Modellrechnungen müssen sowohl Austrittsmengen an der Schadstoffquelle als auch deren Konzentration vorgegeben werden. Bei längeren Verweilzeiten im Untergrund (besonders in der ungesättigten Zone) können auch chemische Abbaureaktionen des betrachteten Stoffes wichtig werden.

Die konzeptionellen Modellvorstellungen, die aus diesen Vorüberlegungen entstehen, können sich stark unterscheiden. Eine Übersicht verschiedener Alternativen, von denen jede durch die Wahl einer der möglichen differierenden Annahmen einen Unsicherheitsbeitrag enthält, ist nachfolgend zusammengefasst dargestellt (Tabelle 2-6 für die Strömungsmodellierung und Tabelle 2-7 für die Transportmodellierung, nach DAGAN, 1997).

Tabelle 2-6: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Strömungsmodellierung

Element des Hydrogeologischen Modells	Kriterium
Soll die heterogene Struktur des Aquifers, die sich in der Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeiten und der Porosität widerspiegelt, zwei- oder dreidimensional modelliert werden?	Die Entscheidung hierüber hängt vor allem davon ab, ob der betrachtete Kontaminationsfall als lokal oder eher als großräumiges Phänomen anzusehen ist.
Soll die Sickerströmung in der ungesättigten Zone als rein vertikaler Fluss modelliert werden oder muss dies in einem dreidimensionalen Modell geschehen?	Diese Wahl hängt stark vom Verhältnis zwischen der Größe der Schadstoffquelle und der Mächtigkeit der ungesättigten Zone ab.
Wie sollen die verschiedenen geologischen 'Formationen' in Untereinheiten diskretisiert werden? Jede Untereinheit soll eine geringere Variabilität der Modellparameter aufweisen als der Gesamtbereich der gesättigten oder ungesättigten Zone.	Die Größe der Untereinheiten hat z.B. einen Einfluss auf die Größe der im Modell anzusetzenden Dispersivitäten.

Tabelle 2-6: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Strömungsmodellierung (Forts.)

Element des Hydrogeologischen Modells	Kriterium
Ist die instationäre Modellierung der Strömung notwendig oder kann sie durch eine stationäre Strömung approximiert werden?	Die Entscheidung ist stark abhängig von der Zielsetzung der Modellierung. Eine stationäre Modellierung kann nur die Grundlage für langzeitige Prognosen bereitstellen.
Ist der Aquifer als ungespannt oder gespannt anzusehen?	Bei geringen Schwankungen der freien Grundwasseroberfläche kann eine konstante Mächtigkeit angenommen werden.
Sind Grundwasserströmung und -transport durch Klüfte in einem felsigen Untergrund geprägt? Klüfte können entweder durch einen äquivalenten Kontinuumsansatz erfasst (mit einem üblichen Grundwassermodell zu behandeln) oder einzeln (diskret) nachgebildet werden.	Vor allem abhängig von der Skala des betrachteten Problems.

Tabelle 2-7: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Transportmodellierung.

Element des Hydrogeologischen Modells	Kriterium
Können die im Wasser gelösten Stoffe als konservativ angesehen werden oder müssen Reaktionsvorgänge berücksichtigt werden?	Abbau oder Zerfall kann von den meisten Transportmodellen berücksichtigt werden. Die Auswirkungen von Reaktionen verschiedener Stoffe untereinander sind bisher nur in wenigen Autorenmodellen berechenbar. So haben z.B. LENSING (1995) und SCHÄFER (2000) mikrobiell katalysierte Redoxreaktionen modelliert.
Kann der gelöste Stoff als inert angesehen werden oder müssen Dichte- und Zähigkeitseinflüsse berücksichtigt werden?	Abhängig von der eingetragenen Menge. Modelle zur Berechnung von Dichteströmungen sind mittlerweile Stand der Technik (z.B. SANFORD U. KONIKOW, 1985).

Tabelle 2-7: Entscheidungskriterien für den Aufbau des Hydrogeologischen Modells für die Transportmodellierung. (Forts.)

Element des Hydrogeologischen Modells	Kriterium
Ist der gelöste Stoff mit Wasser mischbar oder nicht?	Abhängig von der eingetragenen Menge. Die Prognosemöglichkeiten von Modellen zur Berechnung von Mehrphasenströmungen bei nicht-mischbaren Stoffen sind bisher nicht unbedingt als praxistauglich anzusehen.
Welcher Maßstab der Dispersion muss berücksichtigt werden? Ist die Modellierung der Vermischungsvorgänge infolge der Untergrundheterogenität auf einer größeren Skala ausreichend?	Ist abhängig von der Skala des untersuchten Problems.
Sollen als Modellergebnis Konzentrationen an bestimmten Punkten prognostiziert werden oder sind mittlere Werte über die Tiefe oder über einen Kontrollquerschnitt ausreichend?	Ersteres stellt höhere Anforderungen an Datenquantität und -qualität sowie an die Kalibrierung. Aussagen über 'lokale Konzentrationen' sollten vorzugsweise in einem stochastischen Grundwassermodell gewonnen werden.

Vor der Anwendung eines Grundwassermodells sind also eine Reihe von Entscheidungen zu treffen, u.U. ist es daher notwendig, verschiedene konzeptionelle Vorstellungen durch Modellrechnungen zu untersuchen, um die integrierte Wirkung verschiedener Einzelfestlegungen abschätzen zu können.

Die prinzipielle Vorgehensweise bei der Erstellung eines hydrogeologischen Modells wird in FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE (1999) gezeigt. Den Schritt von den Vorstellungen über die tatsächlichen Untergrundverhältnisse zum Hydrogeologischen Modell gibt schematisch die Abbildung 2-2 wieder.

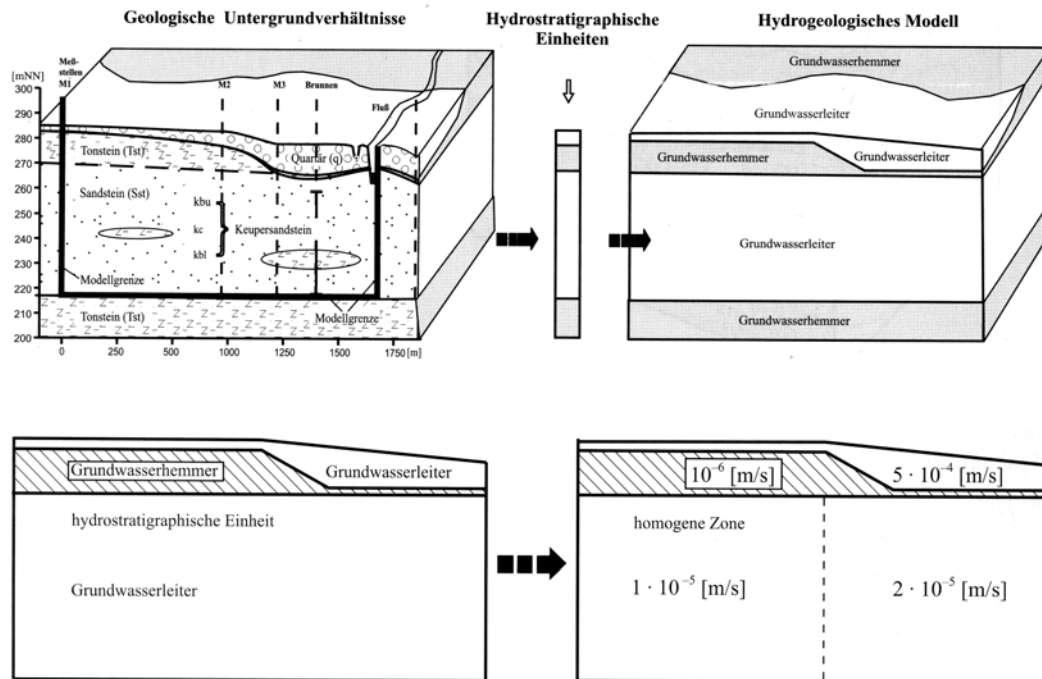


Abbildung 2-2: Entwickeln des Hydrogeologischen Modells und Zuweisung von Aquiferparametern (aus FACHSEKTION HYDROGEOLOGIE, 1999)

2.4 Der stochastische Ansatz zur mathematischen Beschreibung der Heterogenität des Untergrundes

Der Aspekt der Unsicherheit ist in einem traditionellen Hydrogeologischen Modell nur schwer zu integrieren. Verwendet werden hier z.B. Sensitivitätsanalysen, Bracket-Studien u.ä. (z.B. PECK et al., 1988). Die nachstehend beschriebenen Ansätze des stochastischen Bodenmodells¹³ eignen sich hierfür jedoch sehr viel besser, da sie die Fortpflanzung (Propagation) der Unsicherheiten von ihrem Ursprung (der Datengrundlage) bis zu den Modellergebnissen berücksichtigen und quantifizierbar machen können. Mit diesen Methoden ist von ihrer Auslegung her prinzipiell auch eine Reduzierung der Eingangsdatenunsicherheiten möglich.

2.4.1 Grundzüge des stochastischen Bodenmodells

Die Berücksichtigung der räumlichen Variabilität von hydraulischen Eigenschaften hat in dieser Arbeit einen großen Stellenwert. Da es nicht möglich ist, die hydraulischen Eigenschaften an jedem Ort zu ermitteln, ist es notwendig, für die

13. *Stochastisches Bodenmodell* ist die wörtliche Übersetzung des engl. Terms *stochastic soil model*. Im deutschen Sprachgebrauch wird als Boden meist nur die obersten 2m des Untergrundes bezeichnet, hier soll aber der gesamte Aquifer als *Boden* angesprochen werden.

nicht beobachteten oder beprobten Stellen diese auf der Grundlage einer begrenzten Anzahl von Messungen zu schätzen. Voraussetzung hierfür ist eine Modellvorstellung des räumlichen Untergrundaufbaues. Dieses Modell¹⁴ muss eine Beschreibung liefern, wie die Untergrundeigenschaften im Raum variieren. In dieser Arbeit wird ein Typ eines räumlichen Modells verwendet, der die Unsicherheit, die mit der unbekannten räumlichen Variation der hydraulischen Eigenschaften verknüpft ist, berücksichtigen kann. Dieses räumliche Modell wird ganz allgemein in der Literatur als stochastisches Bodenmodell bezeichnet. Die Quantifizierung der Unsicherheiten in den Ergebnissen von numerischen Grundwassermodellen ist auf der Grundlage des stochastischen Bodenmodells möglich, da neben dem Erwartungswert für die Ausgabegrößen Grundwasserstand ($h(\mathbf{x})$) und Stoffkonzentration ($c(\mathbf{x})$) auch deren Varianz bzw. Kovarianz in der Lösung der stochastischen Modellgleichungen enthalten sind.

In diesem Abschnitt soll eine kurze Einführung in die Theorie des stochastischen Bodenmodells und dem damit verbundenen Feld der Geostatistik gegeben werden. Es wird gezeigt, wie Zufallsfelder (die Grundlage des stochastischen Bodenmodells) für die Interpolation und Simulation verwendet werden können, und warum die Simulation im Allgemeinen den besseren Ansatz darstellt.

Bodeneigenschaften sind, abgesehen von ihrem Entstehungsprozess, deterministische Größen. Dennoch muss jeder Versuch einer rein deterministischen Beschreibung ihrer natürlichen Variabilität scheitern, da immer nur eine begrenzte Anzahl von Messungen möglich ist. Berücksichtigt man die verbleibende Unsicherheit über die wahre Verteilung der Messgrößen durch eine stochastische Modellformulierung, kann man neben den deterministischen auch probabilistische Anteile berücksichtigen.

Die Aufgabe des klassischen, in der Literatur beschriebenen stochastischen Bodenmodells besteht darin, an beliebigen Stellen des Untersuchungsgebietes (z.B. an den Knotenpunkten eines Berechnungsnetzes) die jeweils interessierende Bodeneigenschaft stochastisch zu beschreiben.

FREEZE (1975) zeigte den Weg, um die Heterogenität in hydrogeologische Fragestellungen zu integrieren. Nach Meinung von ANDERSON (1997) begann mit ihm eine neue Ära der stochastischen Analyse von Grundwassersystemen. Vor allem die Bedeutung der Unsicherheit bei der stochastischen Charakterisierung der Heterogenität wurde hierbei bereits in den Vordergrund gestellt.

Vor allem in der frühen Literatur, die sich mit stochastischen Analysen von Grundwassersystemen beschäftigt, wird angenommen, dass das geologische Medium in gewissem Maße systematisch strukturiert ist. Als Alternative zu dieser für den allgemeinen Fall eher untypischen Voraussetzung wurden in neuerer Zeit andere konzeptionelle Vorstellungen zur Beschreibung der Heterogenität entwickelt. Hierzu gehören z.B. Fraktale Modelle und Faziesmodelle. Bei ersteren wird unterschieden zwischen monofraktalen Modellen mit einer konstanten fraktalen

14. Der Begriff *Modell* wird in dieser Arbeit in zweifacher Bedeutung verwendet: Einmal für Modelle der räumlichen Variabilität (*räumliche Modelle*) als auch für Modelle, die geophysikalische Prozesse beschreiben (*dynamische Modelle*).

Dimension zur Beschreibung der Heterogenitätsabbildung und multi-fraktalen Ansätzen (LIU U. MOLZ, 1997), die eine veränderliche fraktale Dimension hierzu einsetzen. Diese Ansätze werden ebenfalls mit der Monte-Carlo-Methode gekoppelt (HASSAN et al., 1997) und sind weiterhin Gegenstand der Forschung. Auf Faziesmodelle wird im Abschnitt 2.4.3 kurz eingegangen.

Trotz der vielen Veröffentlichungen seit 1975 (beispielhafte Übersichtsbeiträge stammen von NEUMANN (1982), SUDICKY & HUYAKORN (1991), YEH (1992)) ist die zentrale Frage, ob die stochastischen Methoden auf reale Aquifere unter Feldbedingungen anwendbar sind, weiterhin nicht definitiv entschieden (ANDERSON, 1997). Vor allem die Verfügbarkeit von Felddaten zur Ermittlung der Kovarianzstruktur der hydraulischen Durchlässigkeit ist oft das schwächste Glied in der Anwendung von stochastischen Analysen. In Anbetracht dessen kann die Frage gestellt werden, ob es überhaupt angemessen ist, stochastische Methoden zur Beschreibung von geologischem Material einzusetzen, und weiterhin, ob diese Methoden genug über die geologischen Strukturen aussagen können, um die Ausbreitung von wassergelösten Stoffen im Untergrund beschreiben zu können. Nicht zuletzt zur Klärung dieser Fragen soll die vorliegende Arbeit ebenfalls einen Beitrag liefern.

Wegen der starken Abhängigkeit der lokalen Geschwindigkeiten, der Fließwege und der Stoffausbreitung von der hydraulischen Durchlässigkeit (s. Abschnitt 2.2.1 auf Seite 14), lag der Schwerpunkt der stochastischen Studien mit Bezug zum Grundwasser und Erdöl-Reservoirs eben auf der hydraulischen Durchlässigkeit bzw. der Permeabilität. Variationen in der hydraulischen Durchlässigkeit wirken sich so aus, dass sowohl der Betrag als auch die Richtung des advektiven Transports beeinflusst werden, während Variationen der Porosität nur Einfluss auf den Betrag der Geschwindigkeit haben (SMITH & SCHWARTZ, 1981) und deshalb als von geringerer Bedeutung angesehen werden. Die hydraulische Durchlässigkeit kann über 13 Größenordnungen variieren, die Porosität dagegen nur um weniger als 2 Größenordnungen (0.01-0.60) (FREEZE & CHERRY, 1979).

2.4.2 Geostatistische Interpolation

Die Geostatistik kann als ein Zweig der stochastischen Modellierung angesehen werden, wobei das untersuchte Problem die stochastische Interpolation darstellt. Hier hat vor allem die Ecole des Mines (Fontainebleau, Frankreich) Pionierarbeit geleistet. Entwickelt wurde der geostatistische Ansatz von MATHERON (1965). In der vorliegenden Arbeit werden geostatistische Ansätze vor allem zur Generierung von Parameterfeldern im Rahmen des SUFIX Verfahrens eingesetzt.

Räumliche Variabilität und räumliche Modelle

Wenn eine räumlich variable Eigenschaft des Untergrundes an zwei verschiedenen Orten gemessen wird, sind im Allgemeinen bei nahe zusammen liegenden Orten die zwei Messwerte ähnlicher als im Falle von weiter auseinander liegenden Orten. Dieses Phänomen wird auch als *räumlicher Ähnlichkeitseffekt*¹⁵ bezeichnet. Es gibt

15. *spatial similarity effect* (BIERKENS, 1994)

eine Anzahl verschiedener Typen von 'klassischen' räumlichen Modellen, um die Werte der interessierenden Variablen an unbeprobten Stellen vorherzusagen bzw. zu schätzen. Hierzu gehören z.B. Thiessen-Methode, Trend-Flächen-Methode, Chloropleth-Methode und die lokalen Interpolationsmethoden wie Splines und Inverse Distanz Interpolation.

Zufallsvariable

Ein alternativer Weg zur Schätzung des Wertes z an nicht beprobten Punkten ist die Annahme, dass der Wert das Ergebnis (oder Realisation) einer Zufalls- (stochastischen) Variablen Z darstellt¹⁶. Nimmt man an, dass ein Häufigkeitsdiagramm (Histogramm einer beschränkten Anzahl) von Messungen an anderen Punkten vorhanden ist, und dass die bekannten und gesuchten Werte Ergebnisse stochastischer Variablen sind, die durch die gleiche Wahrscheinlichkeitsverteilung oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(z)$ (im Folgenden nach der englischen Bezeichnung *probability density function* mit pdf abgekürzt) beschrieben werden, dann bedeutet dies, dass das Histogramm eine Schätzung dieser pdf darstellt. Wenn die pdf bekannt ist, kennt man auch die Wahrscheinlichkeit, mit der ein bestimmter Wertebereich an einem unbeprobten Ort gefunden werden kann.

Zufallsfelder und ihre Eigenschaften

Zufallsvariable berücksichtigen nicht die räumliche Natur der Variablen (den räumlichen Ähnlichkeitseffekt), da für jeden unbeprobten Punkt eine eigene Wahrscheinlichkeitsverteilung gilt. Ein Modell, das sowohl den räumlichen Ähnlichkeitseffekt als auch die Unsicherheit des Wertes an diesem Punkt berücksichtigt, nennt man Zufallsfeld (*random field*). Die Definition nach DE MARSILY, (1986): Ein Zufallsfeld $Z(\mathbf{x}, \xi)$, $\mathbf{x} = x$ in einer Dimension, $\mathbf{x} = (x, y)$ in zwei Dimensionen und $\mathbf{x} = (x, y, z)$ in drei Dimensionen, ist eine Funktion im Raum mit einer unbegrenzten Anzahl von möglichen Ergebnissen. Die Variable $\xi \in \xi_1, \xi_2, \dots, Z(\mathbf{x}, \xi_\infty)$ bezeichnet die möglichen Ergebnisse der Funktion Z . Zusammengefasst werden $\{Z(\mathbf{x}, \xi_1), Z(\mathbf{x}, \xi_2), \dots, Z(\mathbf{x}, \xi_\infty)\}$, d.h. alle möglichen Ergebnisse von Z , als *ensemble* bezeichnet. Wenn man die Koordinaten festhält, gleichbedeutend mit der Betrachtung des Zufallsfeldes an einer bestimmten Position \mathbf{x}_0 im Raum, erhält man die Zufallsvariable $Z(\mathbf{x} = \mathbf{x}_0, \xi)$ für diese Position mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(z, \mathbf{x}_0)$. Wenn man dagegen die Variable ξ festhält ($\xi = \xi_1$), erhält man eine einzelne Raumfunktion $z(\mathbf{x}, \xi = \xi_1)$, die man als *Realisation* $z(\mathbf{x})$ für $\xi = \xi_1$ bezeichnet. Abbildung 2-3 zeigt vier verschiedene eindimensionale Realisationen eines Zufallsfeldes. Realisationen eines Zufallsfeldes werden ebenso wie die Ergebnisse einer Zufallsvariable mit Kleinbuchstaben gekennzeichnet.

Ein Zufallsfeld weist den räumlichen Ähnlichkeitseffekt auf. In der Realisation $z(\mathbf{x}, \xi_1)$ ähneln sich z.B. die Werte an zwei beliebigen Punkten $z(\mathbf{x}_a, \xi_1)$ und $z(\mathbf{x}_b, \xi_1)$ im Mittel umso mehr, je näher die beiden Punkte \mathbf{x}_a und \mathbf{x}_b zusammenliegen. Dadurch ergibt sich die Eignung des Zufallsfeldmodells zur Beschreibung der

16. Z ist die Variable und z ihr aktueller Wert. Eine Zufallsvariable wird in der stochastischen Theorie auch als stochastischer Prozess bezeichnet (FAHRMEIER et al., 1981)

unsicheren räumlichen Variation von geophysikalischen Eigenschaften. Eine weitergehende Beschreibung der Konzepte ist in Abschnitt D.1 auf Seite 209 im Anhang zu finden.

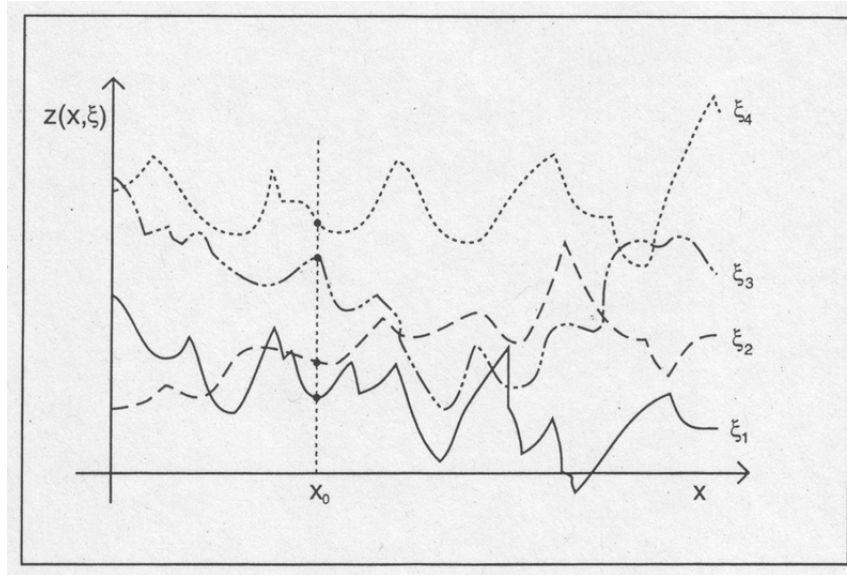


Abbildung 2-3: Vier Realisationen eines eindimensionalen Zufallsfeldes (aus BIERKENS, 1994)

Geostatistische Interpolation und Konditionierung

Wenn Messungen zur Verfügung stehen, kann der räumliche Ähnlichkeitseffekt (d.h. die räumliche Korrelation) dazu genutzt werden, die Werte einer Bodeneigenschaft an unbeprobten Stellen zu ermitteln.

Bei bekanntem Mittelwert und angenommener Stationarität 2. Ordnung (zur Definition s. Anhang Abschnitt D.1 auf Seite 209) ist folgender Schätzer geeignet (Gleichung 2.1).

$$Z^*(x_0) = \mu + \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot (Z(x_i) - \mu) \quad (2.1)$$

mit x_0 : Ort, an dem der unbekannte Wert Z geschätzt werden soll, λ : Gewicht der i -ten Messung und μ : Mittelwert.

Die Gewichte werden so gewählt, dass der Schätzfehler minimiert wird (Gleichung 2.2).

$$E[(Z^*(x_0) - Z(x_0))^2] = \text{minimum} \quad (2.2)$$

Die minimierte Varianz des Schätzfehlers ist dann (Gleichung 2.3):

$$\text{var} [Z^*(x_0) - Z(x_0)] = \sigma^2 - \sum_{i=1}^n \lambda_i C(x_i - x_0) \quad (2.3)$$

mit σ^2 als Varianz und $C(x_i - x_0)$ als Kovarianzfunktion des Zufallsfeldes. Dieses Interpolationsverfahren mit Kovarianzen, bekanntem Mittelwert und einem stationären Zufallsfeld 2. Ordnung wird *simple kriging* genannt. Das Resultat ist nicht nur die Vorhersage für eine unbeprobte Stelle, sondern das Verfahren gibt auch ein Maß für die Unsicherheit der Vorhersage: die Kriging-Varianz. Hier soll noch auf eine besondere Eigenschaft dieses Kriging-Typs hingewiesen werden: Da die Kriging-Varianz nur eine Funktion der Lage der Messpunkte ist, und nicht von den tatsächlich gemessenen Werten abhängt, kann Gleichung 2.3 benutzt werden, Messnetze so zu positionieren, dass der Vorhersagefehler (d.h. Interpolationsfehler) minimiert wird (BRAS & RODRIGUEZ, 1985).

Wenn eine der beiden Voraussetzungen des *simple kriging* (bekannter Mittelwert und endliche Varianz) nicht erfüllt ist, kann das sog. *ordinary kriging* unter Verwendung von Variogrammen eingesetzt werden. Der Schätzer ist dann definiert als (Gleichung 2.4):

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot Z(x_i) \quad (2.4)$$

wobei die Summe aller Gewichte λ_i zusammen 1 ergibt. Die Schätzvarianz ist dann wie in Gleichung 2.5 definiert.

$$\text{var} [Z^*(x_0) - Z(x_0)] = \sum_{i=1}^n \gamma(x_i - x_0) + v \quad (2.5)$$

Dabei wird in v die Unsicherheit der Schätzung des Mittelwertes berücksichtigt. Benötigt wird auch das Variogramm γ , das wie folgt definiert ist (Gleichung 2.6):

$$\gamma^*(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} [Z(x) - Z(x + h \pm \Delta h)]^2 \quad (2.6)$$

mit $n(h)$ als Anzahl der Datenpaare, die einen Abstand $h \pm \Delta h$ besitzen. Δh ist das Suchradius-Inkrement. Die Auswertung der verfügbaren Daten nach Gleichung 2.6 wird als experimentelles Variogramm bezeichnet. Für die Gleichung selbst wird oft auch die Bezeichnung empirisches Variogramm verwendet. In der Literatur wird jedoch auch für das experimentelle Variogramm der Begriff empirisches Variogramm eingesetzt. Die charakterischen Kennwerte eines Variogramms, die als Grundlage für stochastische Simulationen dienen sind in Abbildung 2-4 dargestellt, während Tabelle 2-8 die üblicherweise eingesetzten theoretischen Variogrammtypen zur Anpassung an die experimentellen Variogramme zusammenfasst.

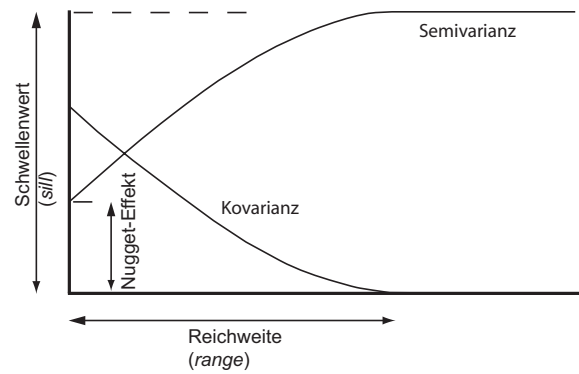
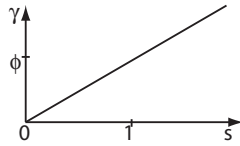
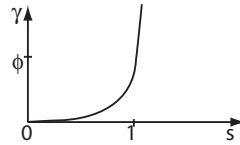


Abbildung 2-4: Kennwerte zur Beschreibung der theoretischen Variogrammmodelle vom Typ sphärisch, exponentiell und Gauss.

Tabelle 2-8: Übliche theoretische Variogrammmodelle

Variogramm-Modell	Mathematische Beschreibung	Darstellung	Bemerkungen
Sphärisches Variogramm (stationär)	$\gamma(s) = \begin{cases} \left(\frac{3s}{2a} - \frac{1}{2} \frac{s^3}{a^3} \right) \sigma_z^2 & \text{für } 0 \leq s \leq a \\ \sigma_z^2 & \text{für } (s > a) \end{cases}$		gebräuchlichster Typ, lineares Verhalten im Bereich kleiner Entfernungen s
Exponentielles Variogramm (stationär)	$\gamma(s) = \sigma_z^2 (1 - e^{-s/a})$		asymptotisches Verhalten σ_z^2 , Reichweite bei 95% des Schwellenwertes, Verwendung insbesondere in der Hydrologie
Gauss'sches Variogramm (stationär)	$\gamma(s) = \sigma_z^2 \left(1 - e^{-s^2/a^2} \right)$		parabolisches Verhalten im Ursprung, geeignet zur Beschreibung von Variablen mit ausgeprägt stetigem Verhalten
Power-Variogramme (Potenzfunktion)	$\gamma(s) = \phi s^n$ mit $0 < n < 2$		nichtstationär (ohne Schwellenwert und Reichweite)

Tabelle 2-8: Übliche theoretische Variogrammodelle (Forts.)

Variogramm-Modell	Mathematische Beschreibung	Darstellung	Bemerkungen
Lineares Semivariogramm	$\gamma(s) = \phi s$		Sonderfall des Power-Semivariogrammes für $n = 1$, als nichtstationäres Modell häufig verwendet
Logarithmisches Variogramm	$\gamma(s) = \phi \log(s + \kappa)$		für Punktdaten nicht verwendbar

2.4.3 Die Verbindung des stochastischen Bodenmodells mit Konzepten der Hydrogeologie

Im Folgenden soll gezeigt werden, wie die im vorigen Abschnitt dargestellten formalen, mathematischen Konzepte des stochastischen Bodenmodells mit den praktischen Erfordernissen der Grundwassermodellierung und einem Unsicherheitskonzept verknüpft werden kann. Die Art der Verbindung ist abhängig von den konzeptionellen Modellvorstellungen zur Struktur des Untergrundes, die aufbauend auf den beobachtbaren geologischen Verhältnissen (Erkundung) in drei Klassen eingeteilt werden können:

- kontinuierliche,
- diskrete und
- Mischansätze

Zu jeder Modellvorstellung existieren zugehörige Verfahren der stochastischen Analyse bzw. Methoden der stochastischen Simulation.

Kontinuierliche Heterogenität

Üblicherweise wird die quantitative Beschreibung¹⁷ der kontinuierlichen Heterogenität mit einem *Gauss'schen* Modellansatz durchgeführt. Das *Gauss'sche* Modell setzt eine kontinuierliche Verteilung der Durchlässigkeiten voraus und verwendet mittlere Werte für die Korrelationslängen und den Mittelwert und die Varianz des gesamten k_f -Feldes. Die hydraulische Durchlässigkeit wird als log-normal verteilt und durch eine einzige Korrelationsskala¹⁸ beschreibbar angesehen. Die Theorie der *Gauss'schen* Modelle ist weit entwickelt und die stochastischen Differentialgleichungen, die auf diesem Modell basieren, sind im Prinzip für einfache

17. Beschreibung mittels statistischer und stochastischer Kennzahlen

18. d.h. alle Strukturen treten räumlich periodisch auf, auch als statistisch homogen bezeichnet

Randbedingungen analytisch lösbar. Verschachtelte Skalen der Heterogenität (*evolving heterogeneity*) können in einem erweiterten Ansatz, z.B. durch ein fraktales Modell, beschrieben werden (HEWETT, 1992).

Es gibt zwei grundsätzliche Ansätze der stochastischen Analysen, die kontinuierliche Modelle verwenden. Der **analytische** Ansatz verwendet stochastische Differentialgleichungen, um explizite Ausdrücke für effektive (mittlere) hydraulische Durchlässigkeiten und Dispersivitäten abzuleiten. Hierbei stellt das Konzept der effektiven Parameter eine Erweiterung der Vorstellung des äquivalenten homogenen porösen Mediums im Bereich der deterministischen Modellierung dar (s.a. Anhang D.2 auf Seite 213). Der zweite Ansatz, der in der **stochastischen** Modellierung bevorzugt wird, spezifiziert dagegen das Parametermittel und die Funktionsparameter eines theoretischen Variogrammodells. Generatoren zum Erzeugen von Zufallsfeldern, die als Eingabedatensätze für numerische Strömungs- und Transportmodelle dienen können, verwenden z.B. diesen Ansatz.

Diskrete Heterogenität

Man weiß, dass auf einigen Skalen geologische Medien nicht kontinuierlich sind und z.B. Faziesübergänge¹⁹ aufweisen und/oder geologische Strukturen, die das Durchlässigkeitsfeld beeinflussen. Als erkannt wurde, dass kontinuierliche Modelle der Heterogenität eher ungeeignet sind, die typischen komplexen geologischen Feldverhältnisse wiederzugeben, wurden Versuche unternommen, stochastische Methoden auf diskrete Modelle der Heterogenität anzuwenden. Diskrete Modelle verwenden geologische Informationen, um Einheiten mit ähnlichen hydraulischen Durchlässigkeiten (Hydrofazies) abzugrenzen. Die Quantifizierung diskreter geologischer Informationen schließt die Verwendung von Faziesmodellen, kombiniert mit der sog. Indikator-Geostatistik, ein. Die räumliche Struktur der Faziesmodelle wird dabei mit Indikatorvariablen (kategorische Variable) beschrieben.

ANDERSON (1989) definierte eine hydrogeologische Fazies als

homogeneous but anisotropic unit that is hydrogeologically meaningful for purposes of field experiments and modeling.

POETER & GAYLORD (1990) führten den Begriff *Hydrofazies* ein für Einheiten mit relativ homogenen hydraulischen Eigenschaften, die den Zusammenhang des Materials definieren, das für das bevorzugte Ausbreitungsverhalten von Schadstoffen maßgeblich ist. Im Unterschied zu hydrostratigraphischen Einheiten, die bevorzugt auf der regionalen Skala ausgewiesen werden, werden Hydrofazies für eine kleinere Skala definiert, auf der auch hydrogeologische Standortuntersuchungen durchgeführt werden. Fazies-basierte Ansätze zur Beschreibung der Bodenheterogenität (z.B. ALLEN-KING et al, 1998) kommen im Prinzip ohne geostatistische Auswertung aus, da die Charakterisierung der Fazies lediglich auf der Ermittlung von

19. Fazies sind Einheiten mit gleichen Charakteristiken. Geologische Strukturen schließen großskalige Eigenschaften ein wie z.B. Verwerfungen, aber auch kleinskalige Elemente wie z.B. Schichtflächen oder Klüfte (s.a. Glossar).

texturellen, strukturellen und lithologischen Eigenschaften beruht. Vorteile bieten sich hier vor allem bei Stofftransportberechnungen, da eine hohe Korrelation zwischen den Fazieseigenschaften und den Transportparametern, wie z.B. der Sorption, zu erwarten ist. Mit der Faziesbeschreibung ist damit auch eine Beschreibung der geochemischen Heterogenität gegeben.

Wenn die Lage der Faziesberandungen bzw. Schichtflächen bekannt ist, wäre es möglich, den $\ln k_f$ -Prozess²⁰ als stationär innerhalb jeder Fazies anzusehen; damit könnte die Nichtstationarität effektiv beseitigt werden. Um jedoch ein derartiges quantitatives Faziesmodell entwickeln zu können, wäre ein sehr großer Erkundungsaufwand notwendig, speziell für einen Standort mit komplexen geologischen Verhältnissen. Man kann den Hydrofazien jedoch Intervalle der hydraulischen Durchlässigkeit zugeordnen, wie dies z.B. bei MCCLOSKEY U. FINNEMORE (1996) durchgeführt wurde. In diesem Sinne beinhaltet auch das hier vorgestellte SUFIX-Verfahren Elemente der Faziesmodellierung, indem den Bohrbeschreibungen k_f -Intervalle zugeordnet und als *soft data* in dem Verfahren behandelt werden.

Bevorzugte Fließwege: Konzeptionelle Faziesmodelle zeigen, dass deterministische Trends in geologischen Umgebungen vorhanden sind und der Zusammenhang bzw. die Verbindung der einzelnen Einheiten untereinander ein hervorstechendes Merkmal des Untergrundaufbaues darstellt. Oft wird dieser Zusammenhang als der 'Schlüssel' zur Quantifizierung der Heterogenität im Zuge von hydrogeologischen Untersuchungen angesehen. WILLIAMS (1988) fasste dieses Problem folgendermaßen zusammen:

... hydrogeologists have not demonstrated that the ensemble average (or any other average) of any hydraulic property is necessarily the critical element of interest in the theory of groundwater flow and transport. ... identification of the so-called fastest path is critical. It is unreasonable to bury the identification of the fastest path in statistical parameters of the total rock population.

Ergänzend ein Zitat von FOGG (1986):

One or two well-connected sands among a system of otherwise disconnected sands can completely alter a velocity field.

FOGG (1990) führte konditionale²¹ stochastische Simulationen von Sandkörperverteilungen in einem fluviatilen Aquifer durch. Er zeigte Wahrscheinlichkeitsdarstellungen des Zusammenhangs dieser Sandkörper über das gesamte Strömungssystem. Danach wird die Verbindungswahrscheinlichkeit dann größer Null und erreicht einen Schwellenwert, wenn die mittleren Sandlängen 20% der Länge des Strömungssystems überschreiten. Er schlug vor, die Zusammenhangswahrscheinlichkeit

20. zum Begriff des Prozesses in der Stochastik s. Fußnote 25. auf Seite 43)

21. Auch als konditionierte Simulationen bezeichnet. Erläuterung im Abschnitt 2.4.4.

als Indikator für einen frühen Durchbruch eines Schadstoffes zu verwenden. Es gibt noch keine zuverlässige Technologie, um diese Strukturen im Untergrund lokalisieren zu können. Geophysikalische Methoden (wie z.B. Bodenradar) sind relativ weit entwickelt, sind jedoch noch nicht ausreichend, um die Heterogenität in einem Aquifer in eindeutiger Weise zu beschreiben. Der Erkundungsaufwand zur Ermittlung der Faziesabgrenzungen bzw. des Zusammenhangs der Fazies erlauben es bisher nicht, sich vorwiegend auf diese Methode zu stützen, wenn die Heterogenität des Untergrundes beschrieben werden soll.

Indikator-Geostatistik: Ein geostatistischer Ansatz zur Erfassung der diskreten Heterogenität ist die Indikator-Geostatistik, die von JOURNEL (1983) eingeführt wurde. Neben anderen verwenden z.B. DAVIS et al. (1993) und JOHNSON (1995) die Indikator-Geostatistik, um Variogramme auf der Basis der Fazies zu erstellen. Bei der Anwendung der Indikator-Geostatistik wird das hydraulische Durchlässigkeitsfeld (repräsentiert durch den stochastischen Prozess $(\ln k_p)$) in eine Treppenfunktion transformiert, die durch Schwellenwerte (*cutoff values*) definiert ist. Bei einer binären Funktion werden beispielsweise die Daten in zwei Gruppen eingeteilt. Die Indikatorfunktion hat dann entweder den Wert 1 oder 0. Die Varianz und die Korrelationslänge sind dann Maße für die Verbindung von hoch durchlässigen Einheiten.

Schematisch zeigt Abbildung 2-5, wie sedimentäre Strukturen durch Indikatorwerte wiedergegeben werden können. Das Blockdiagramm stellt einen hypothetischen Fall mit alluvialen Sedimenten dar und zeigt darunter die Interpretation, die aus der Anwendung der Indikator-Funktion entstanden ist.

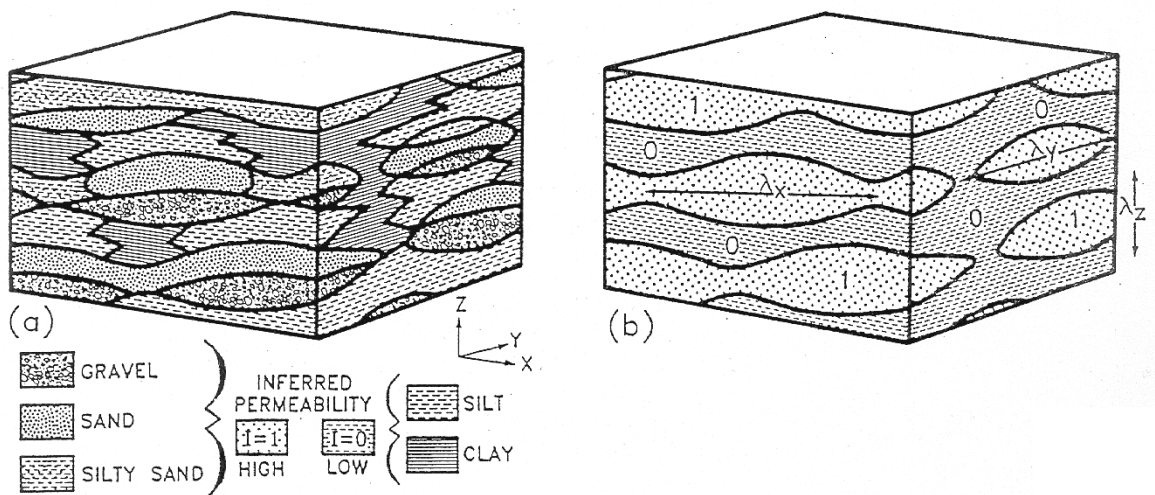


Abbildung 2-5: Schematisches Block-Diagramm von (a) komplex geschichteten alluvialen Sedimenten und (b) die Struktur dieser Sedimente, wenn sie mit einer Indikator-Funktion interpretiert werden (aus JOHNSON & DREISS, 1989).

In dem Beispiel liegt ein idealisiertes geschichtetes System vor, in dem grobkörnige Schichten in eine vorwiegend feinkörnige Matrix eingebettet sind. Die Schich-

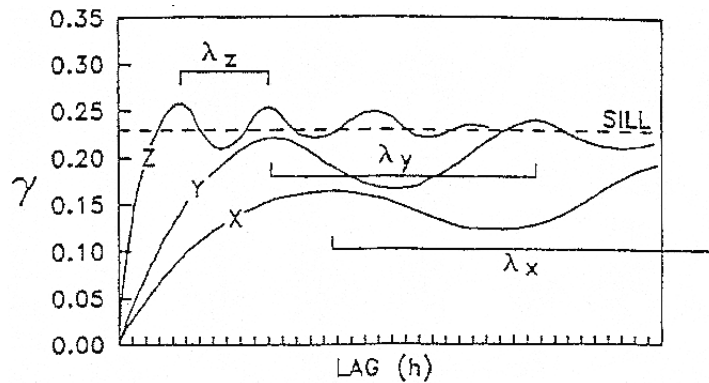


Abbildung 2-6: Schematische Indikator-Variogramme für den Block aus Abbildung 2-5.

ten fallen etwas in x -Richtung ein und sind anisotrop, da die grobkörnigen Schichten in x -Richtung durchgehender sind und sich weiter erstrecken als in y -Richtung. Indikator-Variogramme für diesen Block werden schematisch in Abbildung 2-6 gezeigt. In diesem Beispiel weisen die Richtungsvariogramme in x - und y -Richtung eine räumliche Korrelation entlang der Streichen- und Fallenrichtung der Sedimente auf (ausgedrückt durch λ_x und λ_y), und das z -Variogramm erlaubt Aussagen über die räumliche vertikale Korrelation (λ_z).

Alle drei Variogramme haben einen sog. *sill*-Wert, der der Indikator-Varianz des Blocks entspricht. Voraussetzung ist, dass der Block im Verhältnis zu den Korrelationslängen (den *ranges*) groß ist. Die anisotrope Struktur des Blocks wird wiedergegeben durch unterschiedliche *ranges*. Da die Linsen in Fallen-Richtung mehr verbunden sind und sich über eine größere Entfernung erstrecken, erreicht das x -Variogramm den *sill*-Wert erst bei einer relativ großen Entfernung. Die Ausdehnung der Linsen in y -Richtung ist kleiner, der *sill*-Wert wird in einer kürzeren Entfernung erreicht. Der *range*-Wert für die z -Richtung ist noch deutlich kleiner. Entsprechend der Periodizität der geologischen Strukturen in Abbildung 2-5 zeigen die Variogramme einen gedämpften, sinusförmigen Verlauf, der auch als *hole*-Effekt bezeichnet wird.

JOHNSON & DREISS (1989) interpretieren diese Variogrammform so, dass beim ersten Maximum der x - und y -Variogramme der *range*-Wert etwa der Hälfte der durchschnittlichen Linsenlänge bzw. -breite entspricht. Die Wellenlängen λ_x und λ_y sollen dann die Länge und Breite der Linsen widerspiegeln. Im z -Variogramm soll das erste Maximum erreicht sein, wenn h der durchschnittlichen Schichtdicke entspricht. Wenn die Periodizität der Schichtenfolge nicht perfekt ist, was für tatsächliche geologische Verhältnisse sicher zutrifft, wird die Amplitude des *hole*-Effektes mit größer werdendem Abstand h immer kleiner. Der *hole*-Effekt wird hauptsächlich in den vertikalen Variogrammen auftauchen, da wiederholte Schichten von ähnlichen Dicken wahrscheinlicher auftreten werden als Linsen mit regelmäßigen Geometrien. In jedem Fall müssen die geostatistisch abgeleiteten Strukturen, Anisotropien oder Trends in Einklang mit den tatsächlichen geologischen Verhältnissen gebracht werden.

2.4.4 Die stochastische Simulation

Betrachtet man die hydraulische Durchlässigkeit $k_f(\mathbf{x})$ als Zufallsvariable (im folgenden als $k(\mathbf{x})$ dargestellt), ergibt sich die Konsequenz, dass die Partiellen Differentialgleichungen zur Berechnung der Wasserstände und Konzentrationen zu stochastischen Differentialgleichungen werden (s. z.B. PECK et al, 1988). Die Ergebnisgrößen $h(\mathbf{x})$ und $c(\mathbf{x})$ sind damit auch als Zufallsvariable anzusehen.

Um eine räumliche Verteilung der Ergebniswerte zu erhalten, kann man z.B. eine 'Karte' der gekrigten Werte $k(\mathbf{x})$ oder $\ln k(\mathbf{x})$ als Modelleingangsdaten verwenden. Dies hat jedoch den Nachteil, dass die gekrigte 'Karte' die Erwartungswerte (Mittelwerte) der Modellparameter enthält. Wenn jedoch die darauf angewendeten Operationen nichtlinear sind, wie dies für die Strömungs- und Transportgleichung der Fall ist, entsprechen die Ergebnisse dieser Operation nicht den gesuchten Mittelwerten (Wahrscheinlichste Werte) für $h(\mathbf{x})$ und $c(\mathbf{x})$.

Außerdem ist die gekrigte 'Karte' sehr viel glatter als eine stochastische Realisation eines Zufallsfeldes $k(\mathbf{x})$. Die tatsächliche räumliche Variabilität des Strömungs- oder Konzentrationsfeldes kann so beträchtlich unterschätzt werden. Wenn also das Ziel ist, die volle Wahrscheinlichkeitsverteilung von $h(\mathbf{x})$ und $c(\mathbf{x})$ zu erhalten bei gegebener multivariater Wahrscheinlichkeitsverteilung $k(\mathbf{x})$, ist die Verwendung von gekrigten Eingangsdaten nicht ausreichend. Man benötigt stattdessen die vollständige multivariate *pdf* von $k(\mathbf{x})$.

Daraus kann man folgern, dass für den Fall einer Prognose auf der Grundlage von nichtlinearen Funktionen (wie Grundwassermodellen) stochastische Simulationen notwendig sind, wenn die mit den Prognosen verbundenen Unsicherheiten ebenfalls quantifiziert werden sollen.

Das Ergebnis einer stochastischen Simulation stellt im Wesentlichen die räumliche Verteilung eines Modellparameters, also eine 'Karte', dar. Nach KOLTERMANN & GORELICK (1996) kann diese Karten-Erstellung (*map-generation*) für die hydraulische Durchlässigkeit in zwei Stufen erfolgen: Abbildungs-Erstellung (*image creation*) und nachfolgende Bestimmung der hydraulischen Eigenschaften. In der ersten Stufe werden demnach die geologischen Einflüsse auf die Strömung und den Transport identifiziert, um darauf aufbauend die Geometrie von geologischen oder hydraulischen Attributen eines Strömungsfeldes wiederzugeben. In der zweiten Stufe werden die Strömungs- und Transport-Modellparameter mit der geometrischen Abbildung aus Stufe 1 verknüpft. Das Ergebnis sind Karten der hydraulischen Eigenschaften des Untergrundes.

Konditionale Simulation: In einem rein stochastischen Ansatz wird ein Zufallsfeld-Generator verwendet, um Verteilungen der hydraulischen Durchlässigkeit zu generieren. Dabei ist nicht zu vermeiden, dass Situationen generiert werden, die geologisch für einen bestimmten Standort unrealistisch sind. Von der stochastischen Theorie her gesehen müssten für die nachfolgenden Modelluntersuchungen sicherlich sämtliche Realisationen verwendet werden. Von einem geologischen Standpunkt aus wäre es angebracht, die nicht brauchbaren Realisationen zu verwerfen. Eine andere Alternative ist, die Simulationen so zu beschränken, dass unrealis-

tische Realisationen nicht generiert werden, was dem Grundgedanken der konditionalen Simulation entspricht. Die Simulationen werden so durchgeführt, dass die im Feld gemessenen Parameterwerte an ihren entsprechenden Bezugspunkten wiedergegeben werden.

Das in dieser Arbeit verwendete Verfahren der Konditionierung orientiert sich an einem Ansatz von DE FOUQUET (1994) (s. Abschnitt D.3.2 auf Seite 215).

Eine Erläuterung der einzelnen eingesetzten Verfahren der stochastischen Simulation findet sich im nächsten Abschnitt.

2.4.5 In dieser Arbeit eingesetzte Verfahren zur Abbildung der Heterogenität

Im Sinne eines Methodenvergleichs werden in dieser Arbeit traditionelle Methoden, wie die Erstellung eines Hydrogeologischen Modells, wie auch stochastische Methoden zur Generierung der für Modellrechnungen notwendigen Verteilung der Untergrunddurchlässigkeiten eingesetzt.

KOLTERMANN & GORELICK (1996) teilen die Verfahren zur Generierung von Verteilungen bzw. 'Abbildungen'²² der geologischen Strukturen²³ in drei Kategorien ein:

- (1) *Struktur-imitierende Methoden*. Diese verwenden räumliche Statistik, Wahrscheinlichkeitsregeln und deterministisch zu beschreibende Strukturausprägungen, um geometrische Beziehungen innerhalb von Aquiferen zu ermitteln.
- (2) *Prozess-imitierende Methoden*. Sie basieren auf mathematischen Modellvorstellungen, die entweder die Prozesse, die zur Bildung der geologischen Strukturen führten, oder die physikalischen Vorgänge der Grundwasserströmung und des Transports simulieren.
- (3) *Deskriptive Methoden*. Sie teilen den Aquifer in Zonen auf, indem hydrologische Messungen und geologische Beobachtungen in einem konzeptionellen Modell vereint werden.

Legt man diese Kategorisierung zugrunde, ergeben sich für diese Arbeit die in Tabelle 2-9 aufgeführten Zuordnungen der eingesetzten Verfahren:

22. im engl. Sprachgebrauch als *images* oder *maps* bezeichnet

23. hier als gleichbedeutend mit der Verteilung der sedimentären Ablagerungen bzw. der hydraulischen Durchlässigkeiten angesehen

Tabelle 2-9: In dieser Arbeit eingesetzte Verfahren, klassifiziert nach KOLTERMANN & GORELICK, (1996).

Kategorie	Methode	Verfahren	Erläuterung in
Struktur-nachbildende Verfahren (statistisch)	Gauss-basierende Methoden	Turning Bands	Abschnitt D.3.1 auf Seite 215
	Indikator-Methoden	Sequential Indicator Simulation	Abschnitt D.3.3 auf Seite 218
	- " -	Truncated Gauss	Abschnitt D.3.4 auf Seite 219
	Simulated annealing Methoden	Simulated annealing	Abschnitt D.3.5 auf Seite 220
	Kriging mit <i>soft data</i>	Cokriging	
Prozess-nachbildende Verfahren	Kalibrierungsverfahren	<i>trial & error</i> Kalibrierung	
deskriptive Verfahren	Konzeptionelle Modelle, Hydrogeologische Modelle	manuelle Zonierung	

2.5 Das mathematisch-numerische Modell als Transferfunktion zwischen Erkundung und Prognose

Die Unsicherheiten, die aus der Erkundung bzw. der immer nur unvollständig vorliegenden Kenntnis über den Aufbau des zu modellierenden Untergrundes resultieren, pflanzen sich in der Umsetzung zu einem konzeptionellen hydrogeologischen Modell und anschließend in der Erstellung des numerischen Datenmodells fort. Das Grundwassermodell kann dabei als Transferfunktion zwischen den erkundeten Bodenparametern bzw. deren räumlicher Abbildung und den für ein Sanierungskonzept benötigten zukünftigen Grundwasserständen und Konzentrationen angesehen werden (s. Abbildung 2-7). Zuerst soll das mathematische Modell zur Berechnung der Grundwasserströmung und des Transports von gelösten Wasserinhaltsstoffen vorgestellt werden, um dann die Unsicherheiten im Modellierungsprozess anzusprechen.

Der Datenbedarf eines mathematisch-numerischen Grundwassermodells

Bei den vorgestellten Untersuchungen wurde nur die gesättigte Bodenzone betrachtet. Die ungesättigte Zone wurde bei den Ausbreitungsrechnungen vernachlässigt, da in den Fallbeispielen sich sämtliche Messdaten nur auf die gesättigte Zone beziehen. Diese Datenlage dürfte auch als Regelfall für Altlastensanierungen angesehen werden. Bei akuten Unfallszenarien ist jedoch vorstellbar, dass die Zeit für die Durchsickerung der ungesättigten Zone und eventuell die räumliche Ausbreitung, insbesondere die Entwicklung der lateralen Schadstoffausbreitung, von Interesse sein kann.

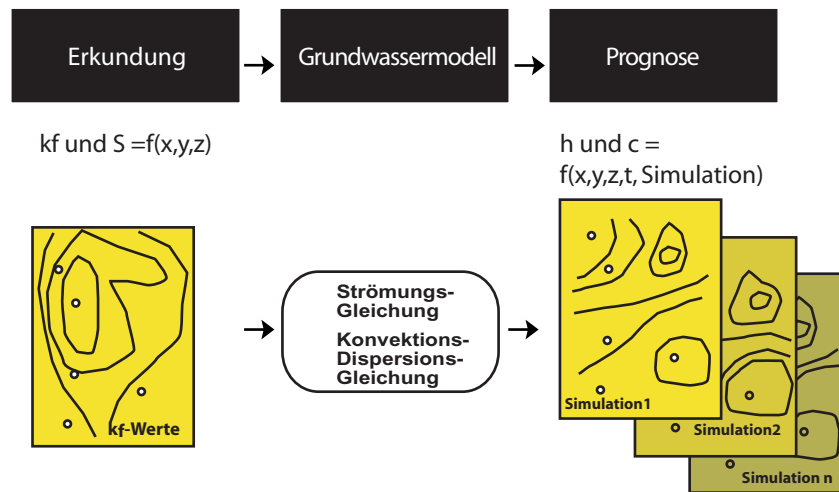


Abbildung 2-7: Grundwassermodell als Transferfunktion zwischen den Erkundungsdaten und den prognostizierten Zustandsvariablen h und c

Unter der Voraussetzung, dass die Darcy-Gleichung angewendet werden darf, ergibt sich für die gesättigte Zone die Strömungsgleichung (Gleichung 2.7) durch Einsetzen der *Darcy*-Gleichung in die Bilanzgleichung wie folgt:

$$\operatorname{div}(\mathbf{k} \operatorname{grad} h) = S_0 \frac{\partial h}{\partial t} - w_0 \quad (2.7)$$

mit h = Potentialhöhe bzw. Grundwasserstand

\mathbf{k} = Durchlässigkeitstensor [m/s]

S_0 = Speicherkoeffizient [-]

w_0 = Quell-/Senkenterm [m/s]

In kartesischen Koordinaten lautet die partielle Differentialgleichung (Gleichung 2.8):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_0 \frac{\partial h}{\partial t} - w_0 \quad (2.8)$$

Vervollständigt wird das mathematische Modell durch die Angabe von Rand- und Anfangsbedingungen. Ausführliche Erläuterungen hierzu finden sich in BUSCH et al. (1993).

Die Ausbreitung von gelösten Stoffen im Grundwasser wird i.Allg. mit der sog. Konvektions-Dispersionsgleichung²⁴ (Gleichung 2.9) mathematisch modelliert (SUN, 1996).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i c) \quad (2.9)$$

Die zu Gleichung 2.7 äquivalente Form lautet:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div} \left[\mathbf{D} \rho \operatorname{grad} \left(\frac{c}{\rho} \right) \right] - \operatorname{div}(c \mathbf{v}) + I \quad (2.10)$$

mit c	=	Konzentration	[mg/l]
\mathbf{D}	=	Dispersionstensor	[m ² /s]
ρ	=	Dichte	[g/cm ³]
\mathbf{v}	=	Abstandsgeschwindigkeit	[m/s]
I	=	Quell-/Senkenterm	[mg/l s]

In kartesischen Koordinaten für 3 Richtungen lautet die zu Gleichung 2.8 entsprechende Form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial c}{\partial z} - c \cdot v_x \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{xy} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial c}{\partial z} - c \cdot v_y \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{xz} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{zy} \frac{\partial c}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} - c \cdot v_z \right) + I \end{aligned} \quad (2.11)$$

Das mathematische Modell der gesättigten Grundwasserströmung verlangt ebenso wie das Modell der Ausbreitung von gelösten Stoffen die Bereitstellung von räumlich und zeitlich differenzierten Daten. Für die Strömungsberechnung sind dies die räumliche Verteilung des Durchlässigkeitstensors \mathbf{k} als auch - bei instationären Rechnungen - die des spezifischen Speicherkoeffizienten S_0 . Da in diesen Untersuchungen nur stationäre Strömungsverhältnisse betrachtet werden, entfallen die letzteren Daten.

Die stationären Ergebnisse der Strömungsmodellierung dienen als Grundlage für die Stofftransportrechnungen, die zeitlich und örtlich variable Konzentrationen von Wasserinhaltsstoffen liefern. Für diese Berechnungen werden Angaben über die räumliche Struktur des Dispersionskoeffizienten \mathbf{D}_{ij} benötigt, der im allgemeinen Fall mathematisch einen Tensor mit neun Komponenten darstellt (s. Gleichung 2.11). In beiden Modellen müssen die entsprechenden Randbedingungen formuliert werden.

24. Nach der engl. Benennung, auch im Deutschen z.T. als Advektions-Dispersionsgleichung bezeichnet.

Betrachtet man den Durchlässigkeitstensor k als Zufallsvariable²⁵, so ergibt sich, dass auch die Zustandsvariablen $h(x)$ und $c(x)$ als Zufallsvariable angesehen werden müssen. Die Gleichungen 2.7 und 2.9, die nun eine stochastische Strömungs- bzw. Transportgleichung darstellen (PECK et al., 1988), verändern sich dadurch formal nicht. Der Dispersionskoeffizient wird in den Fallbeispielen als deterministische Größe angesehen, um die Komplexität der Berechnungen handhabbar zu halten.

Der hier verwendete Fick'sche Makrodispersionsansatz²⁶ beruht auf der Hypothese, dass die Ungleichförmigkeit einer Schadstofffahne aufgrund der Heterogenität des Grundwasserleiters mit demselben Gesetz beschrieben werden kann wie die porenraumbedingte Dispersion, d.h. durch einen zur Abstandsgeschwindigkeit proportionalen Diffusionskoeffizienten, der in Strömungsrichtung einen höheren Betrag annimmt als senkrecht dazu.

Neuere Ansätze zur Beschreibung der Makrodispersion sind zum einen das Zwei-Bereiche-Modell (*dual porosity*) und das stochastische Stromröhren-Modell (s. z.B. CIRPKA, 1997). Im Zusammenhang mit einer Unsicherheitsbetrachtung ist vor allem der letztere Ansatz besonders interessant.

Das Prinzip der stochastischen Stromröhren-Modelle beruht darauf, dass für den Transport im heterogenen Medium unabhängige Stromröhren angenommen werden. In diesen findet ausschließlich advektiver Transport statt und sie lassen somit auch keinen Queraustausch zu. Die genaue Lage der Stromröhren wird nicht untersucht, vielmehr wird für eine Kontrollfläche, die senkrecht zur Strömungsrichtung steht, die Wahrscheinlichkeitsfunktion der Ankunftszeiten von Partikeln, die einer Quelle entstammen, betrachtet (s. Abbildung 2-8).

2.6 Lösungsverfahren der stochastischen Strömungs- und Transportgleichungen

2.6.1 Die Monte Carlo Simulation

Die Monte Carlo Simulation (MCS) ist das am meisten angewendete Verfahren zur Lösung von stochastischen Gleichungen und bildet auch in dem hier vorgestellten SUFIX-Ansatz einen wesentlichen Bestandteil. In der traditionellen Monte Carlo Simulation werden stochastische Simulationen verwendet, um die mathematisch exakte Beschreibung eines physikalischen Prozesses und die u.U. sehr aufwendige Lösung der dazu notwendigen Gleichungen durch die Wahl geeigneter Dichtefunktionen (pdf) zu umgehen (s. COMPUTATIONAL SCIENCE, 1995). In der numerischen Grundwassermodellierung wird jedoch nicht der physikalische Prozess stochastisch

25. In der Theorie der Stochastik werden Zufallsvariable, die einen zeitlich dynamischen Aspekt beinhalten, auch als stochastische Prozesse bezeichnet (Fahrmeier et al., 1981). Obwohl dieses Kriterium für die Bodeneigenschaften i.d.R. ganz und gar nicht zutrifft, werden auch diese stochastischen Variablen in der Literatur oft als stochastische Prozesse bezeichnet.

26. Als Makrodispersion soll hier der Vorgang der Schadstoffverteilung verstanden, der durch Inhomogenitäten des geologischen Aufbaus des Aquifers oberhalb des Porenmaßstabs hervorgerufen wird.

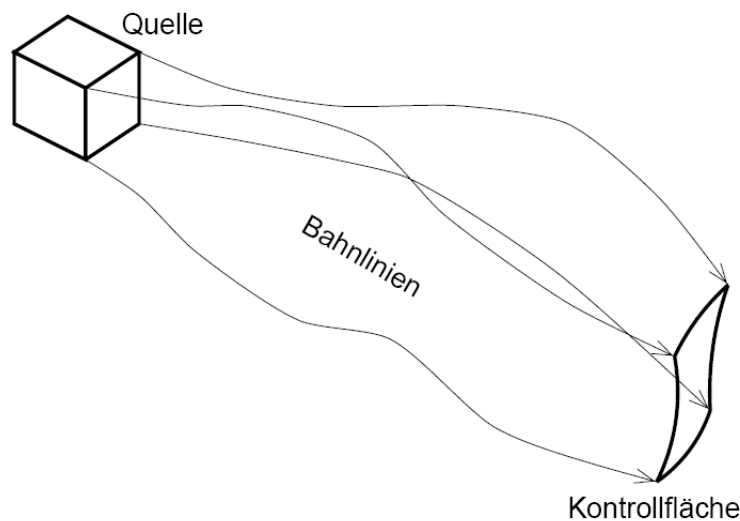


Abbildung 2-8: Prinzip der stochastischen Strömtröhrenmodelle (aus CIRPKA, 1997).

simuliert, z.B. die Grundwasserströmung, sondern die Eingabeparameter des numerischen Prozessmodells. Die stochastischen Simulationen ersetzen also nicht die vollständigen partiellen Differentialgleichungen der stochastischen Prozessbeschreibung, sondern lediglich deren probabilistischen Anteil.

Das Prinzip des Lösungsansatzes besteht darin, dass die Gleichungen des Grundwassermodells mit deterministischen Parametern des stochastischen Bodenmodells gelöst werden. Der probabilistische Anteil der Lösung wird getrennt ermittelt, indem die stochastischen Prozesse durch eine Vielzahl von Simulationen approximiert werden.

Anwendungsprinzip

Die Anwendung erfolgt prinzipiell in drei Schritten (KIEFER, 1992):

- (1) 'Verschlüsseln' des stochastischen Bodenmodells. Dabei wird wie folgt vorgegangen: Wenn N Parameter²⁷ in einem Modell unsicher sind, nimmt man an, dass die pdf's ihrer Unsicherheit bekannt sind. Mit einem Zufallszahlengenerator muss dann eine Vielzahl von Simulationen der bedingten Verteilung der N Parameter (z.B. Durchlässigkeit oder Speicherkoeffizient) erzeugt werden. Die Werte, die diese N Parameter annehmen, können als unabhängig oder korreliert angesehen werden, abhängig z. B. von der verfügbaren Information.
- (2) Kopplung des Bodenmodells mit dem Strömungsmodell. Dies erfordert die herkömmliche, rein deterministische Lösung der Strömungsgleichung für jede der erzeugten Simulationen. Mit dem Parametersatz

27. N entspricht im allgemeinsten Fall der Anzahl der Modellknoten.

als Simulationsergebnis des Bodenmodells wird ein Rechenlauf mit einem klassischen Strömungsmodell durchgeführt, das einen Satz von Ergebnissen liefert. Dann wird eine andere Auswahl von Zufallsparametern gezogen und die Berechnung wird wieder durchgeführt usw.

- (3) 'Entschlüsseln' der Ergebnisse. Die Gesamtheit der erzeugten Lösungen approximiert die stochastische Lösung des Gesamtmodells. Deren Verteilung kann mit Hilfe statistischer Schätzmethoden näherungsweise angegeben werden, indem für jeden Knoten des Modells der Mittelwert, die Varianz und die Kovarianz oder deren pdf berechnet werden. Die statistische Auswertung der Ergebnisse und Vergleich mit Messwerten kann als stochastische Modellkalibrierung angesehen werden.

Die Monte Carlo Methode hat sich in einer Vielzahl von praktischen Anwendungen in der Hydrologie bereits bewährt. FREEZE & MASSMANN (1990) beschreiben einen Monte Carlo Ansatz für die Abschätzung der Parameterunsicherheit als einen Teil einer breiteren hydrogeologischen Entscheidungsanalyse. GOMEZ-HERNANDEZ & WEN (1994) verwendeten Monte Carlo Simulationen zur Quantifizierung der Unsicherheiten in Fließzeitermittlungen aufgrund der Unsicherheit in den Transmissivitäten. Sie diskutierten ebenfalls den Nutzen von *soft data* für die Schätzung des Transmissivitätsfeldes. JAMES & OLDENBURG (1997) beschrieben eine Fallstudie, wo MCS Analysen verwendet wurden, um die Auswirkungen der Unsicherheit in Strömungs- und Transportparametern auf simulierte Konzentrations-Profile abzuschätzen.

Die Monte Carlo Simulation ist sicherlich das mächtigste Verfahren zur näherungsweisen Lösung der unter einem stochastischen Gesichtspunkt formulierten Strömungs- und Transportgleichung. Die Methode kann selbst dann angewendet werden, wenn viele Klassen von Parametern gleichzeitig als unsicher anzusehen sind. Die klassischen Methoden, wie Spektralanalyse und die Perturbationsmethode (s. Abschnitt 2.6.2), sind dagegen mehr für Anwendungen geeignet, in denen die Unsicherheit infolge *eines* Parameters untersucht wird.

Der Hauptnachteil der MCS stellen zweifellos die hohen Ansprüche an Rechenzeit und -kapazität dar. Dagegen steht, dass diese Methode leicht zu implementieren ist, und jedes beliebige bereits vorhandene Grundwassermodell hierin einsetzbar ist. Es muss lediglich ein Unterprogramm vorhanden sein, dass in der Lage ist, unabhängig oder gemeinsam für die jeweilige pdf (evtl. mit Berücksichtigung von internen Korrelationen) Stichprobenwerte für die Parameter zu ziehen.

Der klassische Ablauf, wie z.B. bei SHRESTA & LOGANATHAN (1994) erläutert, sieht demnach schematisiert dargestellt wie folgt aus (Abbildung 2-9).

Bei Betrachtung der klassischen Monte Carlo Methode fällt vor allem auf, dass keine Rückkopplung zwischen den Ergebnissen und den Eingangsdaten der Simulationen besteht. Ein Optimierungsschritt, der die am besten geeigneten Simulationen ermittelt ist in der klassischen MCS nicht vorgesehen.

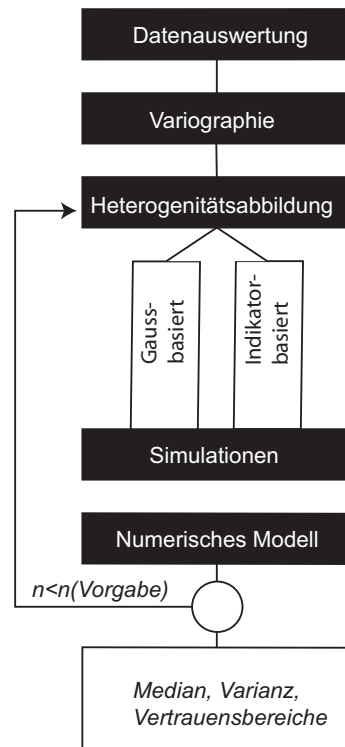


Abbildung 2-9: Schema der Monte Carlo Simulationen.

Das in dieser Arbeit verwendete SUFIX-Verfahren, das in Abschnitt 2.7.1 erläutert wird, enthält wesentliche Elemente der Monte Carlo Simulationen, stellt aber auch eine deutliche Erweiterung dieser Methode dar.

2.6.2 Analytische Verfahren

Analytische Lösungsverfahren werden in dieser Arbeit nicht verwendet. Aus Gründen der Vollständigkeit findet sich im Anhang (Abschnitt D.5 auf Seite 225) eine kurze Erläuterung der zwei meistverwendeten Verfahren: der Perturbationsmethode und der Spektralanalyse.

2.6.3 Das Bayes-Theorem

Die BAYES'-Statistik unterscheidet sich von der klassischen Statistik darin, dass die Wahrscheinlichkeitsberechnungen zwar auf gemessenen Daten basieren, aber auch zusätzlich die Einbeziehung von subjektiven Schätzungen möglich ist. Die BAYES'-Statistik kann man folgendermaßen beschreiben (RINNE, 1995):

$$P[A_i|B] = \frac{P[B|A_i] \cdot P[A_i]}{\sum_{j=1}^n P[B|A_j] \cdot P[A_j]} \quad (2.12)$$

mit $P[A_i]$ = *prior*-Wahrscheinlichkeit für A_i und $P[A_i|B]$ als *posterior*-Wahrscheinlichkeit für A_i . Gleichung 2.12 definiert eine bedingte Wahrscheinlichkeit, d.h. ist das Ereignis B eingetreten, so bewirkt dies i.Allg. eine Änderung der Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses A_i . Die Gleichung 2.12 gibt damit an, wie die vor einem Experiment gemessenen *prior*-Wahrscheinlichkeiten für A_i ($i=1, \dots, n$) durch neue Ergebnisse B modifiziert bzw. konditioniert werden sollten, um die *posterior*-Wahrscheinlichkeiten zu erhalten. Die *prior*-Schätzung von A_i kann allein auf früheren Erfahrungen beruhen oder auch auf Erfahrungen zusammen mit bereits vorhandenen Daten. Wenn neue Daten verfügbar werden, wird die Wahrscheinlichkeitsschätzung zu einer *posterior*-Schätzung mit einem höheren Grad an Aussagesicherheit. Wenn nur wenige Daten verfügbar sind, können sich die Schätzungen aus der BAYES'-Statistik deutlich von denen der klassischen Statistik unterscheiden. Je mehr Daten jedoch zur Verfügung stehen, um so stärker nähern sich die Ergebnisse an.

2.6.4 Methodenvergleich

In der nachstehenden Tabelle 2-10 wird auf der Grundlage von Literaturrecherchen eine Bewertung der wichtigsten Methoden zur Lösung der stochastischen Strömungs- und Transportgleichung zusammengefasst dargestellt.

Tabelle 2-10: Bewertung der Verfahren zur Lösung der stochastischen Strömungsgleichung (nach Literaturangaben)

Stochastisches Simulationsverfahren	Statistische Aussagekraft des Modellergebnisses	Berechnungsverfahren	Berechnungsaufwand	Programmieraufwand	Anwendbarkeit in der Ingenieurpraxis
Monte Carlo Simulationen	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, weitere Statistik ableitbar	viele einfache numerische Simulationen	hoch	geringer zusätzlicher Programmieraufwand	trotz hohem Berechnungsaufwand stochastisches Standardsimulationsverfahren
First Order Second Moment Verfahren (FOSM)	Mittelwerte, Varianzen, Kovarianzen	komplexe numerische Simulation	hoch	äußerst hoch	infolge des hohen Programmieraufwandes eher ungünstig
Störungstheoretischer Ansatz	Mittelwerte, Varianzen, Kovarianzen	komplexe analytische (teilweise auch numerische) Berechnung	niedrig	hoch	nur einfache Problemstellungen gesonderte Programmierung notwendig

Tabelle 2-10: Bewertung der Verfahren zur Lösung der stochastischen Strömungsgleichung (nach Literaturangaben) (Forts.)

Stochastisches Simulationsverfahren	Statistische Aussagekraft des Modellergebnisses	Berechnungsverfahren	Berechnungsaufwand	Programmieraufwand	Anwendbarkeit in der Ingenieurpraxis
Spektralmethoden	Mittelwerte, Varianzen, Kovarianzen	komplexe analytische Berechnung	niedrig	hoch	nur einfache Problemstellungen gesonderte Programmierung notwendig
Adjoint Method	Mittelwert, Sensitivität	komplexe numerische Simulation	niedrig	mittel	komplizierte, aber effiziente Anwendung
Direct Method	Mittelwert, Sensitivität	einfache numerische Simulationen	mittel	niedrig	gute Anwendbarkeit, jedoch Aussagekraft begrenzt
Einfache Sensitivitätsanalysen	Mittelwert, Sensitivität	einfache numerische Simulationen	mittel	kaum zusätzlicher Programmieraufwand	gute Anwendbarkeit, jedoch Aussagekraft begrenzt
Bracketing Studien	Mittelwert, Extremwerte	einfache numerische Simulationen	niedrig	kaum zusätzlicher Programmieraufwand	einfache Anwendung, Aussagekraft jedoch stark eingeschränkt (oft unrealistisch)
Fuzzy Techniken	unscharfe, klassifizierte Statistik	einfache numerische Simulationen, zusätzliche Auswertung	niedrig	mittel	stark eingeschränkte Aussagekraft (leicht irreführend)
FORM/SORM	Versagenswahrscheinlichkeit von Grenzbedingungen	analytische Berechnungen und numerische Simulationen	abhängig von der Anzahl der Parameterunsicherheiten	abhängig von der Anzahl der Parameterunsicherheiten	nur bei wenigen Parameterunsicherheiten gute Anwendbarkeit

2.7 Umsetzung in ein praxisgeeignetes Vorgehen zur Quantifizierung der Prognoseunsicherheit

In diesem Abschnitt werden die im Abschnitt 2.2 identifizierten Quellen der Unsicherheit mit den Ansätzen für ein stochastisches Bodenmodell aus Abschnitt 2.4 zusammengeführt, um die Sicherheit der Modellergebnisse bzw. der daraus abgeleiteten Prognoseaussagen zu quantifizieren und zu maximieren. Ein grundlegendes Werkzeug, dass für die praktische Umsetzung eines Konzeptes zur Unsicherheitsanalyse geeignet ist, stellen die in Abschnitt 2.4 vorgestellten geostatistischen Verfahren dar, da hier die Berücksichtigung der Korrelation als ein wichtiges Element der Unsicherheitsbetrachtung (s. Tabelle 2-1) umgesetzt ist.

Eine hydraulische Sanierung verlangt die Kontrolle eines Strömungsfeldes und zielt u.a. darauf ab, eine Schadstofffahne innerhalb eines begrenzten Aquifervolumens zu halten. Die Maßnahmen hierfür umfassen im idealen Fall einen kombinierten Einsatz von Grundwassermanagement-Modellen zusammen mit numerischen Simulationsmodellen (CRIMINISI et al., 1997). Als Ergebnis ist ein optimierter Entwurf für die Anordnung von Entnahme- und Infiltrationsbrunnen zu erwarten, der die Gesamtkosten einer Sanierung minimiert. Die Gesamtkosten setzen sich zusammen aus Kosten für das Pumpen und die Wasseraufbereitung sowie den Installationskosten für die Brunnen²⁸.

Die Zuverlässigkeit dieser Modelle hängt vor allem von der Unsicherheit der räumlichen Verteilung der Aquiferparameter ab. Dies sind hydraulische Durchlässigkeit, Speicherkoeffizient und Dispersionskoeffizient. Zur Reduzierung der Unsicherheiten können sowohl Messungen der Aquiferparameter als auch Messungen der sog. Zustandsvariablen wie Grundwasserstand und Stoffkonzentration herangezogen werden. Die Zustandsvariablen sind über das numerische Modell mit den eigentlich interessierenden Modellparametern verknüpft. Das Ziel eines praxisgeeigneten Verfahrens zur Quantifizierung der Zuverlässigkeit einer Sanierungsalternative muss also sein, die Parameter-Unsicherheit zu quantifizieren und die Propagation (Fortpflanzung) dieser Unsicherheiten in eine Unsicherheit der Modellvorhersage zu 'übersetzen' (COPTY & FINDIKAKIS, 2000).

Die hier vorgestellte und eingesetzte Methode der Quantifizierung der Prognoseunsicherheit basiert vor allem auf den Arbeiten von ABBASPOUR (1997, 1998, 1999, 2000), der das SUFI-Verfahren (*Sequential Uncertainty domain parameter Fitting*) entwickelte, und einer Veröffentlichung von COPTY & FINDIKAKIS (2000). Die beiden Methoden wurden kombiniert und um die Einbeziehung von *soft data* zur Konditionierung der Durchlässigkeitsfelder erweitert. Außerdem wurde ihre Eignung für praktische Anwendungen anhand von echten Felddaten evaluiert, was in den Veröffentlichungen der Autoren bisher nicht durchgeführt wurde. Zur Kennzeichnung dieser Erweiterungen wird im Folgenden das weiterentwickelte Verfah-

28. Verknüpft hiermit ist das Problem der optimalen Anordnung von Messstellen zur Identifizierung der Kontaminationsquelle (MAHAR & DATTA, 1997) und der optimalen Anordnung von Bohrpunkten zur Ermittlung von Aquiferparametern (CRIMINISI et al., 1997). Diese beiden Aspekte werden in der Arbeit aber ausgeklammert.

ren mit SUFIX²⁹ bezeichnet. Das originale SUFI-Verfahren (ABBASPOUR, 1997) erlaubt die Berücksichtigung von *a priori*-Verteilungen der als unsicher deklarierten Modellparameter, die nach einer *Bayes'-sequential updating*-Prozedur als *a posteriori*-Verteilungen mit einer verringerten Unsicherheit behaftet sein sollen. Das Verfahren von COPTY & FINDIKAKIS (2000) ist sehr ähnlich konzipiert, beinhaltet aber nicht den *updating* Prozess. Dafür wird hier mittels des *Bayes*-Theorem eine direkte Gewichtung der Wahrscheinlichkeit für eine geeignete Reproduktion der tatsächlichen Durchlässigkeitsverteilungen durch stochastische Simulationen vorgenommen.

2.7.1 Das SUFIX Verfahren

Das Verfahren ergänzt und modifiziert den Ablauf einer deterministischen Modellierung an drei Stellen:

- (1) bei der Erkundung und Datenaufbereitung,
- (2) bei der Heterogenitätsabbildung und
- (3) bei der Auswertung der Modellergebnisse mittels einer *Bayes' Sequential Updating*-Prozedur.

Der Schritt der Variogrammanalyse gehört zur Standardmethode der Unsicherheitsbetrachtung im Zusammenhang mit der Modellierung. Hier werden anschließend üblicherweise stochastische Simulationen zusammen mit der Monte Carlo Methode eingesetzt, ohne die Unsicherheiten der vorhergehenden Erkundungs- und Auswerteschritte explizit zu quantifizieren. Im SUFIX Verfahren wird jedoch die Propagation der Unsicherheiten, die im ersten Schritt als Eigenschaft der Eingangsdaten festgelegt werden, bis zum Modellergebnis verfolgt. Im letzten Schritt ist dann prinzipiell über die Rückkoppelung zu den Eingangsdatenverteilungen eine Reduzierung der Unsicherheit dieser Daten möglich.

Zusammengefasst kann man die Hauptschritte des SUFIX-Ansatzes wie folgt darstellen:

SUFIX 1A: Auswertung sämtlicher verfügbarer Informationen und ihre Bereitstellung als *hard* bzw. *soft data*. Hier werden aus den Bohrbeschreibungen mittels einfacher Transferfunktionen die k_f -Werte für die jeweiligen Schichten berechnet.

SUFIX 1B: Darauf aufbauend wird die Festlegung des Unsicherheitsbereiches für jeden einzelnen Parameter (*a priori*-Wahrscheinlichkeit bzw. *prior uncertainty domains* der Eingabe-Parameter) vorgenommen. Dies geschieht durch eine probabilistische Beschreibung der Eingabedaten. Die Form (Art) der Wahrscheinlichkeitsfunktion eines Parameters hängt von der Information ab, die hierfür verfügbar ist. Für die hydraulische Durchlässigkeit kann dies eine lognormale Verteilung sein, für ein *worst case*-Szenario kann der Unsicherheitsbereich als ein Intervall angesehen werden, d.h. als eine gleichförmige Wahr-

29. SUFI eXtended

scheinlichkeitsverteilung zwischen physikalisch realistischen oberen und unteren Grenzwerten. Zusätzlich können auch nominale Parameter berücksichtigt werden, z.B. der Typ einer Randbedingung oder die Wahl zwischen einem chemischen Gleichgewichts- oder Ungleichgewichtsmodell.

VARIOGRAMM: Geostatistische Auswertung (Variographie) mit unsicheren und sicheren Parametern getrennt und kombiniert.

SUFIX 2: Abbildung der Heterogenität mittels:

- Generierung von stochastischen Realisationen des hydraulischen Durchlässigkeitsfeldes. Die Realisationen sind so konditioniert, dass sie die räumlichen statistischen Kennwerte des *ensembles* (s. Abschnitt 2.4.2 auf Seite 28) global einhalten, als auch an den Messpunkten von *hard-* und *soft data* die jeweiligen Werte wiedergeben.
- geostatistischer Interpolation, z.B. mit Cokriging.
- manueller Zonierung der Bereiche mit gleichen Durchlässigkeiten.

SUFIX 3: In einem nächsten Schritt wird die Parameter-Unsicherheit mittels eines Simulations-Modells in eine Ziel-Funktion propagiert. Das heißt, dass die Fortpflanzung der Unsicherheiten aus dem ersten Bearbeitungsschritt weiter verfolgt wird. Hierfür kann SUFIX entweder ein vollständiges stratifiziertes Stichprobenverfahren oder ein zufällig stratifiziertes Verfahren zur Entnahme von Stichproben aus den oben dargestellten Verteilungen einsetzen. Das stratifizierte Stichprobenverfahren basiert auf einer Unterteilung der kumulativen Wahrscheinlichkeitsverteilung in einzelne Straten (Schichten) gleicher Auftretenswahrscheinlichkeit für jeden unsicheren Eingabeparameter. Der Mittelwert jedes Stratum wird als repräsentativ für das Stratum selbst angesehen.

Abbildung 2-10 verdeutlicht dies für einen log-normal verteilten Parameter, wie z.B. die gesättigte hydraulische Durchlässigkeit.

Wird eine vollständige Stichprobennahme durchgeführt, muss das anschließende Simulationsprogramm alle möglichen Kombinationen von Straten durchrechnen. In Abbildung 2-11 wird dies für 4 Parameter gezeigt, wobei drei Parameter jeweils 5 Straten und ein Parameter deren zwei aufweist und demzufolge 250 ($5 \times 5 \times 5 \times 2$) Kombinationsmöglichkeiten bestehen. In der Abbildung wird für die Parameter-Straten eine Gleichverteilung angenommen, jedoch ist hier jede andere Verteilung prinzipiell einsetzbar (s.a. Abschnitt D.4 auf Seite 223).

Die Anzahl der zu wählenden Straten sollte vom Problem abhängig gemacht werden. Eine große Zahl von Straten kann - wegen der geringeren Zahl von Iterationen - die Konvergenz beschleunigen. Zu viele Straten führen jedoch möglicherweise zu einer nicht mehr akzeptablen Anzahl von Simulationsläufen. Werden z.B. 10 Parameter in das Verfahren einbezogen und jeder Parameter wird in 3 Straten eingeteilt, so sind beim vollständigen Stichprobenverfahren $3^{10} = 59049$ Rechenläufe erforderlich. Für diese Fälle erlaubt SUFI die oben erwähnte stratifizierte Stichprobennahme. Hierbei wird für die Simulationsrechnungen eine Teilmenge aller Parameterkombinationen verwendet.

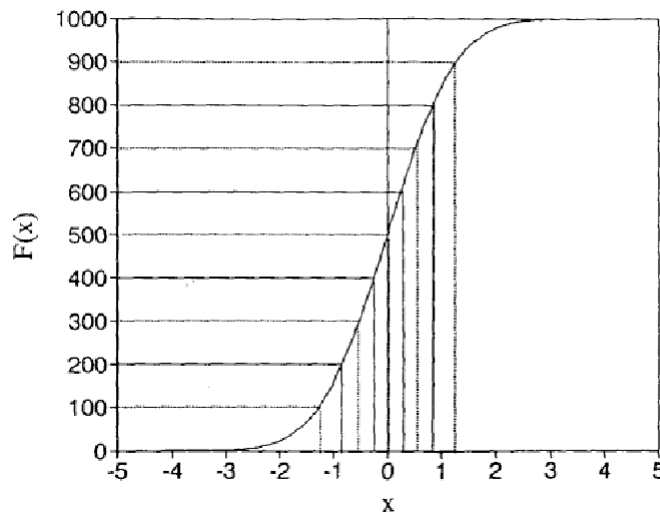


Abbildung 2-10: Unterteilung eines verteilten Parameters in gleich große Straten für eine vollständige stratifizierte Probenahme. Gepunktete Linien zeigen die Mittelwerte der Straten an. Verwendung in Schritt SUFIX 1B (aus ABBASPOUR et al. 1997).

Für jeden der 250 Simulationsläufe des Beispiels wird dann der Wert der Zielfunktion berechnet.

Im Falle der zufälligen stratifizierten Stichprobennahme wird nur eine zufällig ausgewählte Untermenge der Daten für die Simulationen verwendet. Die Wahl zwischen beiden Vorgehensweisen hängt vor allem von der Anzahl der Parameter und der Rechengeschwindigkeit des Simulationsprogramms ab.

SUFIX 4 (Auswertung): Jedes Parameter-Stratum in der SUFIX-Analyse trägt einen Zähler, der anfangs auf Null gesetzt wird. Nach jeder Simulation wird die Zielfunktion berechnet. Wenn diese ein vorher festgelegtes Toleranzkriterium unterschreitet, wird der Zähler für das Stratum um 1 erhöht. Nach Abschluss aller Simulationsläufe wird für jedes Stratum eine Auswertung in Form einer Häufigkeitsverteilung vorgenommen (s. Abbildung 2-12).

Die horizontale Achse zeigt hierbei die Parameterbereiche an, während die y-Achse die Anzahl der Treffer angibt. Im nächsten Schritt werden die Bereiche auf der x-Achse, die außen liegen und keine oder nur wenige Treffer aufweisen, entfernt. Man erhält so für den nächsten Iterationsschritt eine verbesserte Abgrenzung der Unsicherheitsbereiche. Mit jeder Iteration sollte also der Unsicherheitsbereich kleiner werden, und die Zielfunktion kann parallel dazu ebenfalls verringert werden.

Die Ermittlung der Wahrscheinlichkeit, dass eine Realisation die tatsächliche Verteilung des Durchlässigkeitsfeldes widerspiegelt, erfolgt, indem zusätzlich zu

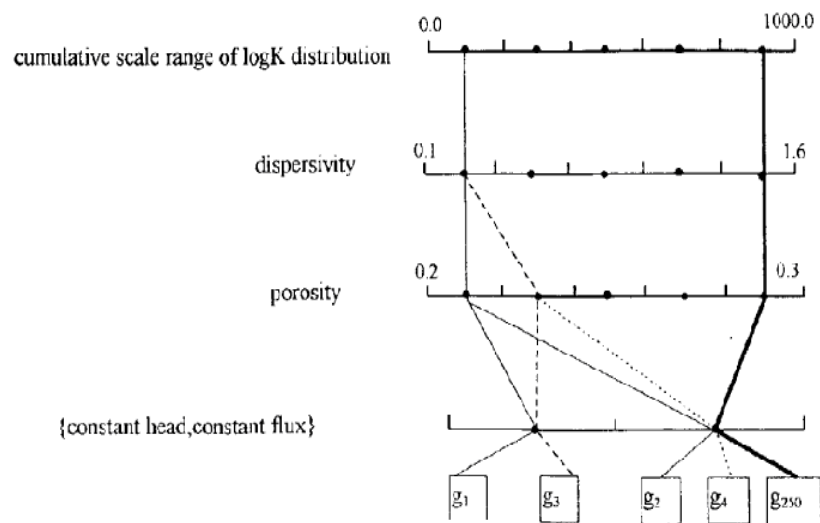


Abbildung 2-11: Schematische Darstellung der Fortpflanzung der Unsicherheit in einer vollständigen Stichprobennahme. Die 250 möglichen Werte der Zielfunktion werden in einer kumulativen Häufigkeitsverteilung ausgewertet. Entspricht im Prinzip dem Schritt SUFIX 3 (aus ABBASPOUR et al. 1997).

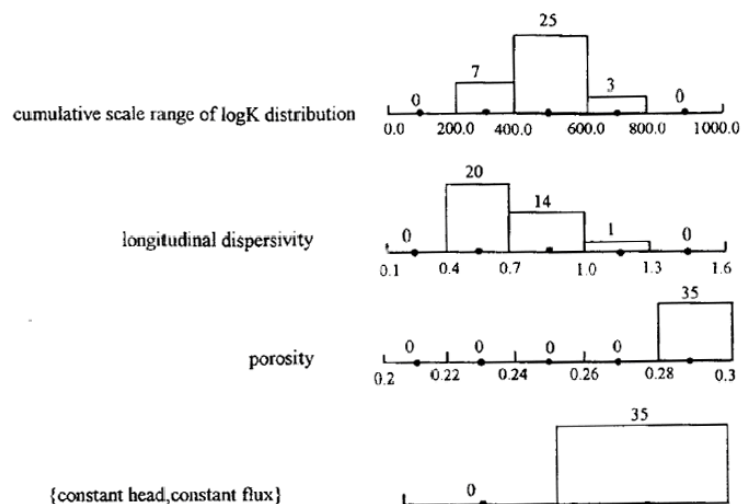


Abbildung 2-12: Auswertung nach Häufigkeit der Unterschreitung einer Zielfunktion. Anwendung im Schritt SUFIX 4 (aus ABBASPOUR et al. 1997).

den Durchlässigkeitsdaten auch historische Daten über Konzentrationsmessungen im Grundwasser verwendet werden³⁰. Dies wird erreicht, indem versucht wird, die gemessene Stoffausbreitung mit jeder der Realisationen zu reproduzieren. Anschließend werden die simulierten mit den gemessenen Werten verglichen. Für die Beurteilung der Güte der Übereinstimmung können unterschiedliche Zielfunktionen eingesetzt werden (s. Abschnitt 2.7.2). Das Gewicht jeder Realisation wird ermittelt mit Hilfe des *Bayes*-Theorems. Realisationen, die eine bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Konzentrationen produzieren, erhalten ein höheres Gewicht für die Wahrscheinlichkeit, die tatsächliche Verteilung der k_f -Werte wiederzugeben. Im SUFIX Verfahren erhalten Realisationen, die den Gütewert der Zielfunktion unterschreiten das Gewicht 1, alle anderen das Gewicht 0.

Für die praktische Anwendung bedeutet dies, dass für jede Sanierungsalternative Simulationen mit allen Realisationen durchgeführt und mit dem zugehörigen Gewicht bewertet werden. Alternativ können auch nur diejenigen Realisationen hierfür eingesetzt werden, die eine vorgegebene Zielfunktion erfüllen. Anschließend kann für jede Sanierungsvariante eine statistische Bewertung nach bestimmten Kriterien durchgeführt werden. Beispielsweise spielt hier die Fähigkeit, eine Schadstofffahne innerhalb eines begrenzten Bodenvolumens zu halten, oder die maximale Masse der wiedergewinnbaren Stoffe eine Rolle. Schematisch ist der Ablauf des SUFIX-Verfahrens in Abbildung 2-13 zusammenfassend dargestellt.

Die bisher traditionell am häufigsten eingesetzte Methode zur Ermittlung der Prognoseunsicherheit von Grundwassersmodellen ist die Monte Carlo Simulation (MCS), die bereits in Abschnitt 2.6.1 ausführlich beschrieben wurde. Die MCS stellt einen Bestandteil des SUFIX-Konzeptes dar und wird hier, entsprechend der Systematik von KIEFER (1992), wie folgt eingesetzt :

- (1) 'Verschlüsseln' des stochastischen Bodenmodells: Im SUFIX-Verfahren erfolgt die Verschlüsselung über alternative Optionen. Hierzu gehören z. B. die Generierung gleichwahrscheinlicher stochastischer Parameterfelder (Schritt SUFIX 2), die manuelle Zonierung oder die stochastisch basierte Zonierung mit Generierung von pdfs der Zonenparameter (SUFIX 1B).
- (2) Kopplung des Bodenmodells mit dem Strömungsmodell: Dies ist Teil des Schritt SUFIX 3.
- (3) 'Entschlüsseln' der Ergebnisse: Dies wird in dem hier vorgestellten Ansatz im Schritt SUFIX 4 geleistet.

30. *posterior uncertainty domains* mit wesentlich verringerten Unsicherheitsbereichen. Das Abbruchkriterium (Konvergenzkriterium) wird durch einen Toleranzwert der Zielfunktion vorgegeben.

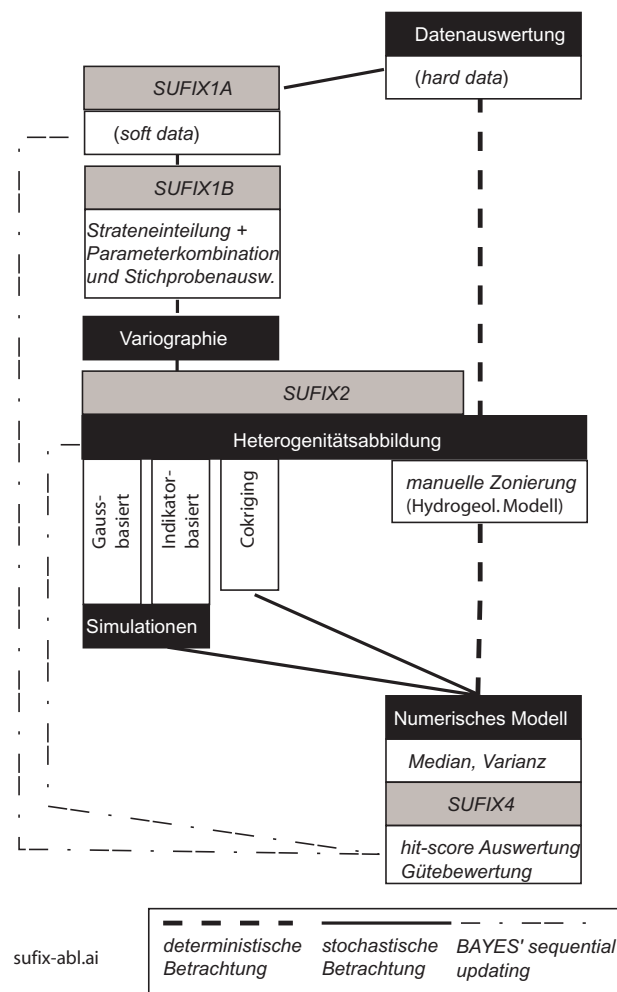


Abbildung 2-13: Prinzipieller Ablauf einer Modellierung unter Einbeziehung des SUFIX-Verfahrens.

2.7.2 Das Problem der Zielfunktion

Im Schritt SUFIX 4 des Verfahrens ist mittels der *Bayes' Sequential Updating*-Prozedur die Verringerung der Unsicherheiten der Eingangsparameter möglich. Jedes bekannte Konzept zur Verringerung der Modellparameter-Unsicherheiten, so auch das SUFIX-Verfahren, basiert im Prinzip auf einem Optimierungsproblem. Eine Optimierung ist jedoch nur möglich, wenn eine Zielfunktion³¹ definiert ist und

31. Die Zielfunktion oder Gütefunktion definiert das zu optimierende Kriterium bei einer Optimierungsaufgabe (und damit das zu lösende Problem), Zielfunktionswert oder Gütewert ist der Wert, den die Zielfunktion für eine Simulation liefert; der Zielfunktionswert ist problemspezifisch (z.B. Wertebereich, Skalierung)

hierfür ein Zahlenwert als Kriterium für die anzustrebende Güte angegeben ist. Das Ergebnis der Optimierung ist abhängig von der gewählten Zielfunktion, wie folgendes einfache Beispiel zeigt (Abbildung 2-14). Auf Grundlage der Zielfunktion

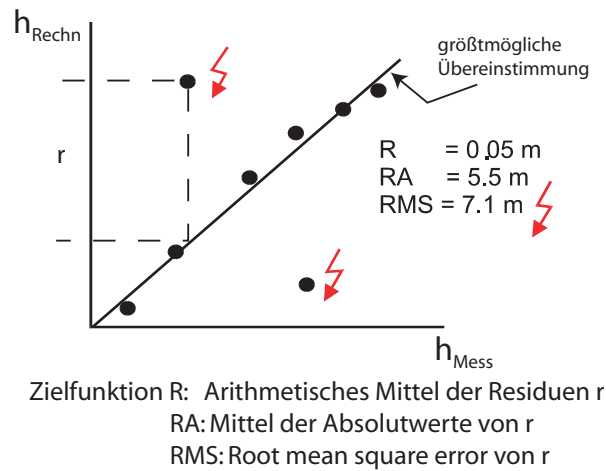


Abbildung 2-14: Verschiedene Zielfunktionen führen zu verschiedenen Gütwerten bei gleichen Modellergebnissen.

'Arithmetisches Mittel R ' wäre bei einem Gütwert von $R \sim 0$ die Optimierung abgeschlossen, während bei der Anwendung einer besser geeigneten Zielfunktion unter Einbeziehung der absoluten Fehler die tatsächliche Güte der Modellrechnung besser erkannt wird. In dieser Arbeit werden deshalb verschiedene Zielfunktionen eingesetzt, die jeweils abhängig von der zu treffenden Aussage gewählt werden.

Insgesamt gehen drei Komponenten in die Formulierung einer Zielfunktion ein. Die erste betrifft die Berücksichtigung der Zeit bei instationären Modellrechnungen wie den Transportberechnungen. Hier kann über sämtliche Zeitschritte gemittelt werden, oder die Zielfunktion beinhaltet eine differenzierte Auswertung für jeden einzelnen Zeitschritt. Weiterhin wird generell zwischen lokal und global orientierten Zielfunktionen unterschieden. Erstere berücksichtigen die Modellierungsgüte an jedem Messpunkt, während bei den globalen Zielfunktionen über alle Messpunkte gemittelt wird. Als dritte Komponente kann in die Formulierung einer entsprechenden Funktion die stochastische 'Dimension' mit einbezogen werden, was in dem Original-Ansatz von SUFI nicht umgesetzt war. In SUFIX wurde deshalb auch eine von COPTY & FINDIKAKIS (2000) vorgeschlagene Zielfunktion eingesetzt, die diese Komponente berücksichtigt (s. Gleichung 2.14).

Alle Formulierungsmöglichkeiten, die sich aus der Kombination der verschiedenen Komponenten ergeben, sind in Tabelle 2-11 zusammengefasst. Werden stationäre Strömungsberechnungen betrachtet, entfällt die Zeitkomponente. Die Bedeutung der Kürzel in Spalte 1 sind in der Tabelle 2-12 erläutert.

Tabelle 2-11: Mögliche Formulierungen für Zielfunktionen (ZF) bei Transportberechnungen (instationär); die Kennung in Spalte 1 gibt den Typ der Auswertung in der Reihenfolge Zeit, Ort, Simulation an.

Kurzbezeichn. für ZF ^a -Typ	Beschreibung	Ansätze für Zielfunktion in der Literatur	Bedeutung als Zielfunktion	Typische Darstellungsform
DDD	lokale Residuen als Funktion der Zeit und der stochast. Simulationen	Residuen: $h_m - h_o$ ^b	Bewertung der Güte der Simulationen nach lokalen Kriterien	Ganglinien der Varianz der Residuen an jeder Messstelle
DDI	lokale ZF über die Simulationen integriert, als Funktion der Zeit	Residuen	systematische Fehler im hydrogeol. Modell identifizierbar	Ganglinien der Residuenmittel an jeder Messstelle
DID	globale ZF über den Ort integriert, als Funktion der Zeit und der stochast. Simulationen	RMSE, (ABBASPOUR, 1997)	für Verfahrensbeurteilung geeignet	Ganglinie der Varianz des globalen Fehlers
DII	globale ZF über den Ort und die stoch. Simulationen integriert, als Funktion der Zeit		für Verfahrensbeurteilung geeignet	Ganglinie des mittleren globalen Fehlers
IDD	lokale ZF über die Zeit integriert, als Funktion der stochast. Simulationen		Bewertung der Güte der Simulationen nach lokalen Kriterien, Systematische Fehler im hydrogeol. Modell identifizierbar, Grundlage für updating von Simulationen	Isolinienpläne der zeitlich gemittelten Residuen für jede Simulation
IDI	lokale ZF integriert über Zeit und stoch. Simulationen	Residuen	systematische Fehler im hydrogeol. Modell identifizierbar	Isolinienplan
IID	globale ZF über Ort und Zeit integriert, als Funktion der stoch. Simulationen	RMSE	Auswahl der besten Simulationen	Tabelle
III	globale ZF	<i>Lack of fit</i> (SCHOLTEN & VAN DER TOL, 1998)	nur zur Beurteilung von Verfahren geeignet	Kennzahl

a. ZF: Zielfunktion

b. h_m : Modellergebnis, h_o : Messung

Tabelle 2-12: Anmerkung zu den Kurzbezeichnungen für die Zielfunktionstypen.

1. Buchstabe: Zeitkomponente		
bei instationären Rechnungen:		bei stationären Rechnungen:
D : Differenzierte Zeitschrittbetrachtung	I : Mittelung über alle Zeitschritte	-
2. Buchstabe: Ortskomponente		
D : Differenzierte Betrachtung jedes Messpunktes	I : Mittelung über alle Messpunkte	
3. Buchstabe: Stochastische Komponente		
bei Rechnungen mit mehr als einer Simulation:		bei deterministischen Rechnungen:
D : Differenzierte Betrachtung jeder Simulation	I : Mittelung über alle Simulationen	-

Typische Auswertungsbeispiele für jeden Zielfunktionstyp zeigt die Abbildung 2-15.

Durch Vergleich mit einer Zielfunktion wird die Beurteilung der Qualität des Ergebnisses der Modellrechnung ermöglicht. Erfüllt das Modellergebnis die Vorgabe des Kriteriums, wird rückwirkend geschlossen, dass auch der zugehörige Eingabedatensatz die tatsächliche Verteilung der k_f -Werte in der Natur widerspiegelt. Eine Reduzierung der Unsicherheit der Eingabedaten ist also dadurch möglich, dass nur diejenigen Eingabedatenkombinationen für Prognosen verwendet werden, die zu Modellergebnissen führen, welche die Anforderungen einer vorgegebenen Zielfunktion erfüllen.

Eine oft verwendete Zielfunktion stellt der *root-mean-square error* (RMSE) dar (Gleichung 2.13).

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_m - x_s)_i^2} \quad (2.13)$$

wobei x_m der gemessene Wert ist, x_s ein simulierter Wert und n die Anzahl der Messungen. Als Messwerte werden in dieser Arbeit Grundwasserstände und Konzentrationsmessungen verwendet

Der Ansatz von COPTY & FINDIKAKIS (2000) (Gleichung 2.14) bezieht sich direkt auf die Simulationen und gibt für jede Simulation die Wahrscheinlichkeit an, dass das generierte Durchlässigkeitsfeld die natürlichen Verhältnisse wiedergibt.

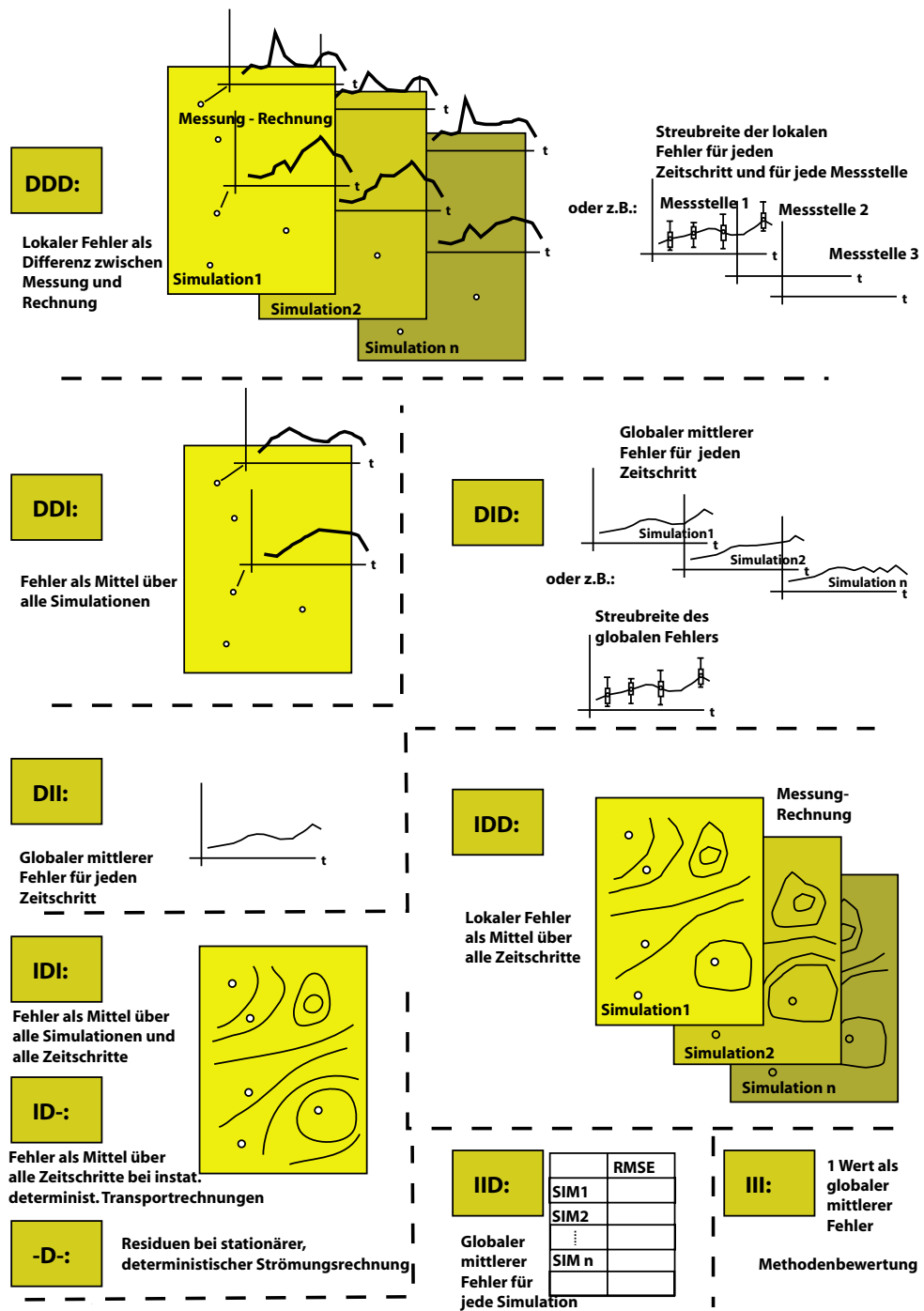


Abbildung 2-15: Auswertungsbeispiele für die verschiedenen Zielfunktionstypen aus Tabelle 2-11, (Reihenfolge der Kurzbez. ist: Zeit, Ort, Simulation)

$$\text{Prob}[c_j^n | Y^{c,m}] \approx \frac{1}{\sum_{j,n} [(\ln(c_j^n) - \mu_j^{n,m})^2 + (\sigma_j^{n,m})^2]} \quad (2.14)$$

mit

c_j^n	historische Konzentrationsdaten am Messpunkt j zur Zeit n
$Y^{c,m}$	Realisationen der \ln transformierten hydraulischen Durchlässigkeiten
$\mu_j^{n,m}$	Mittelwert der \ln transformierten simulierten Konzentrationen am Punkt j , der Zeit n und die Realisation m
$\sigma_j^{n,m}$	Standard Abweichung der \ln transformierten simulierten Konzentrationen am Punkt j , der Zeit n und die Realisation m

Die Einsatzmöglichkeiten der verschiedenen Zielfunktionsformulierungen werden abschließend im Kapitel 5 noch einmal aufgegriffen und einer Wertung unterzogen.

2.7.3 Integration von Daten unterschiedlichen Typs

Das vorgestellte SUFIX-Verfahren erlaubt im Schritt SUFIX 1A die gleichzeitige Verwendung von unterschiedlich zuverlässigen Daten zur Optimierung der Modellparameter. Neben den erwähnten Messungen der hydraulischen Durchlässigkeit nach verschiedenen Methoden bzw. der Ableitung aus Tracerversuchen (*hard-data*) können damit auch Daten verwendet werden, die eine große Unsicherheit besitzen, wie z.B. die Ableitung von k_f -Werten aus Bohrbeschreibungen (*soft data*). Im folgenden Abschnitt wird dargestellt, wie diese Daten mit geringerer Zuverlässigkeit für diese Arbeit generiert und in das SUFIX integriert wurden.

Klassifizierungsschema

Aus den vorliegenden Bohrbeschreibungen soll zum einen ein geologisch-hydraulisches Modell erstellt werden, welches alle strömungs- und transportrelevanten geologischen Strukturen beinhaltet. Gleichzeitig sollte die Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeiten in allen drei Dimensionen als wichtige Modellierungsgröße aus den Grunddaten abgeleitet werden. Als erster Schritt wurde deshalb die geologische Beschreibung der angetroffenen Schichten in Zahlenwerte codiert. Den vier Bodenarten der Profile (Ton, Schluff, Sand, Kies) kann man entweder jeweils einen Kennwert zuordnen (Multiindikator-Ansatz, siehe z.B. JOHNSON & DREISS, 1989) oder direkt mittels einer Transferfunktion die zugehörigen k_f -Werte ableiten (s. Tabelle 2-13). Grundlage für die hier erstellten Transferfunktionen waren Basisangaben aus der Literatur, wie etwa in Abbildung 2-16 gezeigt. Die Wertebereiche für jede Bodenart wurden anhand der Messungen in den jeweiligen Untersuchungsgebieten eingengt. Die Auswirkung von Beimengungen anderer Bodenarten wurde durch eine entsprechende Modifikation der k_f -Werte berücksichtigt. Die gewählte Unterteilung der Texturen orientiert sich an der bei Siebanalysen verwendeten Darstellung. In Tabelle 2-13 ist jeweils als k_f -Wert der Mittelwert der

Wertebereiche angegeben, der gesamte mögliche Wertebereich wurde in den Fallstudien den einzelnen Verfahren angepasst gewählt und ist dort jeweils beschrieben.

Der Einsatz von Transferfunktionen zur Generierung von aufwendig zu messenden Parametern aus einfacher zu beschaffenden Ausgangsgrößen gehört mittlerweile zu den Standardverfahren vor allem bei der Modellierung in der ungesättigten Zone (s. z.B. SINOWSKI et al., 1994; TIETJE, 1993). Die Problematiken derartiger Konvergenzen behandeln z.B. KÖHNE & PIOTROWSKI (1995).

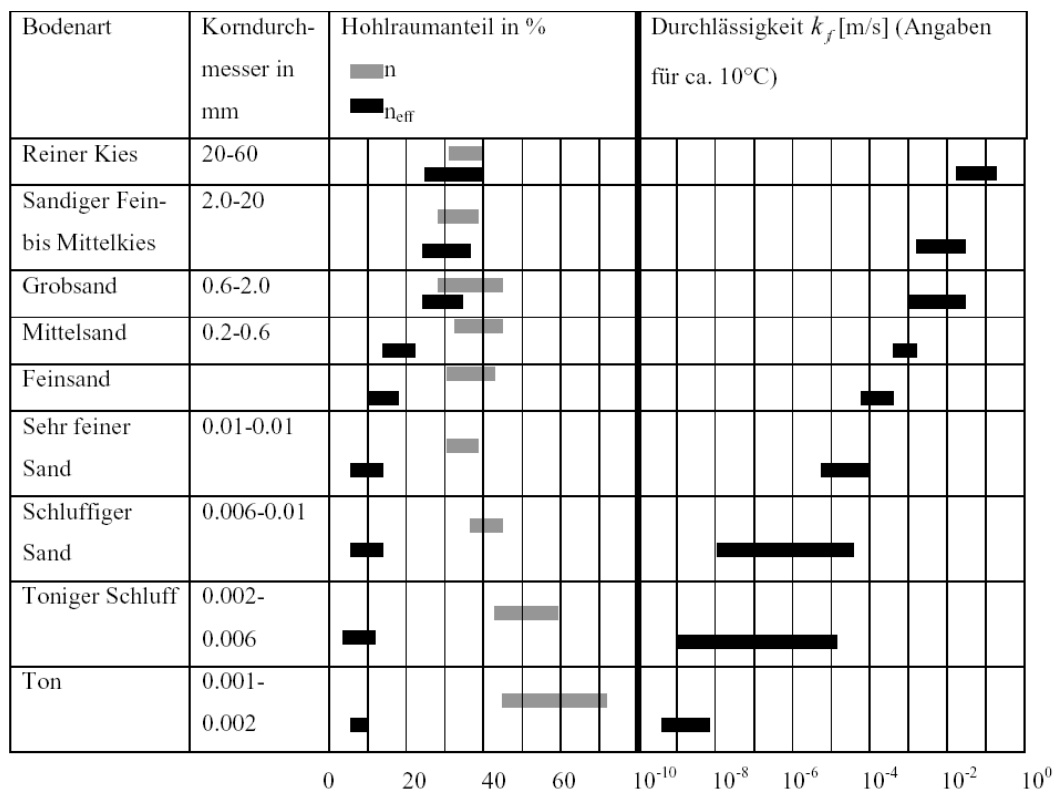


Abbildung 2-16: Durchlässigkeit k_f bzw. Permeabilität für einige Lockergesteine und Böden.

Tabelle 2-13. Ableitung der k_f -Werte aus der geologischen Bohransprache

Bodenart	abgeleiteter k_f -Wert [m/s]
Ton Quarzit, Tonschiefer, Fels	10^{-9}
Schluff, Löss	10^{-7}
Mutterboden, Aufschüttung	10^{-6}
Feinsand	6×10^{-6}
Mittelsand	5×10^{-5}

Tabelle 2-13. Ableitung der k_f -Werte aus der geologischen Bohransprache (Forts.)

Bodenart	abgeleiteter k_f -Wert [m/s]
Grobsand	10^{-4}
Feinkies	10^{-3}
Mittelkies	5×10^{-3}
Grobkies	10^{-2}
Beimengungen	Ab-/Zuschlag
Grobkies (gg) zu Grobsand	$k_f \times 4$
gg zu Sand	$k_f \times 4$
gg zu Mittelsand	$k_f \times 4$
gg zu Feinsand	$k_f \times 6$
Mittelkies (mg) zu Sand (fein bis grob)	$k_f \times 5$
Feinkies (fg) zu Grobsand	$k_f \times 2.5$
fg zu Sand	$k_f \times 4$
fg zu Mittelsand	$k_f \times 4$
fg zu Feinsand	$k_f \times 5$
Ton(t) zu Sand	$k_f / 3$
t zu Grobkies	$k_f / 3$
t zu Mittelkies	$k_f / 3$
Schluff (u) zu Sand	$k_f / 2$
u zu Feinsand	$k_f / 2$
u zu Grobkies	$k_f / 2$
u zu Mittelkies	$k_f / 2$
Sand (s) zu Mittelkies	$k_f / 1.5$

2.8 Alternative Verfahren

2.8.1 GLUE Methode

Der Grundgedanke von GLUE (*Generalized Likelihood Uncertainty Estimation*) ähnelt in vielen Aspekten dem von SUFIX, wie es in dieser Arbeit eingesetzt wird. Die Methode wurde von BEVEN & BINLEY (1992) entwickelt. Auch hier bildet die Monte Carlo Methode das zentrale Verfahren zur Ermittlung der Unsicherheiten in den Modellergebnissen. Als Zielfunktion zur Beurteilung der Güte einer Realisation wird ein Wahrscheinlichkeitsmaß (*likelihood measure*) verwendet. Für eine einzelne Messstelle gilt folgende Definition für das Wahrscheinlichkeitsmaß L_i , dass die Wahrscheinlichkeit ausdrückt, dass Messung und Simulation an einem Punkt übereinstimmen:

$$L_i = P(h_{\text{obs}, i} = h_{\text{sim}, i}) = \frac{1}{2\pi\sigma_i} e^{(-\text{RHS}_i^2)/(2\sigma_i^2)} \quad (2.15)$$

mit

σ_i = erwartete Standardabweichung der Differenzen zwischen Messung und Simulation am Punkt i

RHS_i = Differenz zwischen Messung und Simulation am Punkt i

Als Gütekriterium für die Ablehnung einer Realisation wird generell die 3 fache Standardabweichung verwendet. Für die globale Gütebeurteilung werden die Wahrscheinlichkeiten L_i aller Punkte miteinander multipliziert.

Praktische Anwendungen der GLUE Methode beziehen sich auf die Unsicherheitsbetrachtung bei der Bestimmung von Brunneneinzugsgebieten (FEYEN et al., 2001; JENSEN & SCHAARUP-JENSEN, 2002) und auf die Abflussermittlung von Oberflächengewässern (FREER et al., 1996).

2.8.2 Methode der 'schrittweisen Regression'

Die Methode der schrittweisen Regression (*stepwise regression methode*) wurde von SUN et al. (1998) als Kalibrierungsverfahren vorgeschlagen. SUN bezeichnet die Ermittlung der Modellstruktur als Hauptproblem der Kalibrierung. Sein Ansatz erlaubt die simultane Optimierung von Modellstruktur und den zugehörigen Parameterwerten zusammen mit Managementkriterien. Die *stepwise regression* Prozedur beinhaltet:

- (1) Durchführung einer klassischen Optimierung auf der Grundlage einer homogenen Struktur des Modellgebiets, als G_1 bezeichnet und der Messwerte der Grundwasserstände und der Stoffkonzentrationen.
- (2) Aufteilung des Gebiets in 2 Zonen (G_2). Dies geschieht mit der Festlegung von zwei beweglichen Punkten x_1 und x_2 . Alle Modellknoten, die näher an x_1 als an x_2 liegen gehören zu Gebiet 1 und umgekehrt. Die Optimierung findet die beste Lage für x_1 und x_2 und die optimalen Parameterwerte für die beiden Zonen.

- (3) Berechnung des Fehlers aufgrund der Struktur, indem G_1 als Ersatz für G_2 verwendet wird. Die Berechnung des Fehlers stellt sich als Lösung eines max-min Problems dar. Die Lösung des komplexeren Modells (G_2) wird dabei als Messung verstanden, während die Differenzen zum Modell G_1 nach Lösung des inversen Problems mit G_1 den Strukturfehler darstellen.
- (4) Mit einem geeigneten Verfahren (*Adjoint state* oder *Finite Differenzen Methode*) wird die Zone ermittelt, die sich am sensitivsten gegenüber den gefundenen Parametern verhält. Diese wird dann wieder geteilt entsprechend Schritt (2). In diesem Schritt wird das optimierte Modell G_3 mit den entsprechenden Parameterwerten gefunden.
- (5) Entsprechend Schritt (3) wird der Strukturfehler ermittelt, indem G_3 durch G_2 ersetzt wird. Die Schritte (4) und (5) werden solange wiederholt, bis der Strukturfehler und die Differenzen zu den Messwerten eine festgelegte Schranke unterschreiten.
- (6) Durch einen abschließenden Vergleich der Messwertdifferenzen mit dem Strukturfehler kann z.B. für den Fall, dass letzterer immer noch sehr groß ist, geschlossen werden, dass zusätzliche Daten erhoben werden müssen.

Konkrete Anwendungen des Verfahrens sind bisher nicht bekannt.

2.8.3 Inverse Kalibrierung zusammen mit der Pilot Point Methode

Die Pilot Point Methode (PPM) stellt alleine gesehen eine Alternative zur manuellen Zonierung des Modellgebietes dar, wobei die ermittelten Parameterwerte nicht *a priori* festgelegten Zonen, sondern den über das Modellgebiet verteilten *Pilot Points* zugewiesen werden. In einem zweiten Schritt werden die Punktwerte mittels eines geeigneten Interpolationsverfahrens den Modellknoten bzw. den Elementen zugewiesen. Zum erstenmal verwendet wurde diese Methode von DE MARSILY et al. (1984) und ist mittlerweile bereits in kommerziell vertriebener Grundwassermodell-Software verfügbar (GMS, 2004).

Eine Erweiterung unter Einbeziehung von stochastischen Simulationen wurde dann von RAMARAO et al. (1995) und LAVENUE et al. (1995) durchgeführt. Prinzipiell ist die PPM damit in der Lage die Unsicherheiten von Modellprognosen zu quantifizieren. COOLEY (2000) zeigt in einer kritischen Untersuchung die notwendigen Restriktionen bei der Anwendung des Verfahrens. Eine wichtige Einschränkung ist der Einsatz eines linearisierten Grundwassermodells, wenn konditionierte stochastische Simulationen verwendet werden. Das Grundwassermodell ist dann eine lineare Funktion der log transformierten Transmissivitäten.

COOLEY (2000) zeigte, dass diese Methode recht gute Ergebnisse liefert, solange angenommen werden kann, dass der Anteil von Fehlern (Differenzen zwischen gemessenen und berechneten Grundwasserständen) mit unbekannter Ursache klein ist. Als Fehler unbekannter Ursache sind nach den Ergebnissen dieser Arbeit wohl vor allem

Unsicherheiten im gewählten hydrogeologischen Modell zu sehen.

Weitere Nachteile sind die Tendenz zu einer Überparametrisierung, deren Auswirkungen in einer Unsicherheitsanalyse nur schwer quantifiziert werden können. Überparametrisierung heißt, dass die Anzahl der *pilot points* zu groß wird und unrealistische Strukturen als Artefakte in den kalibrierten Transmissivitätsfeldern entstehen können.

2.8.4 Trial and Error Kalibrierung

Im SUFIX -Verfahren ist implizit eine Kalibrierungsprozedur durch das *Bayes' - Sequential-Updating* enthalten. In diesem Abschnitt soll kurzgefasst eine Abgrenzung zur traditionellen *Trial and Error*-Kalibrierung vorgenommen werden.

Das in der Praxis immer noch standardmäßig eingesetzte Verfahren zur Minimierung der Modellparameter-Unsicherheiten ist das sog. *Trial and Error*-Verfahren der Kalibrierung. Die Modellparameter werden subjektiv über mehrere Versuche so variiert, dass eine möglichst geringe Abweichung zwischen Messwerten und Modellergebnissen auftritt. *Soft data* werden derart integriert, dass beim Kalibrierungsprozess z.B. 'plausible' Grenzen für k_f -Werte beachtet werden. Um die Zahl der Freiheitsgrade der Kalibrierung zu begrenzen, wird üblicherweise eine Aggregation ähnlicher k_f -Werte vorgenommen, was als Zonierung bezeichnet wird. Eine physikalische Begründung hierfür besteht darin, dass bedingt durch die Genese von Lockergesteins-Aquiferen sich Bereiche mit ähnlichen hydrogeologischen Eigenschaften zum einen als Schichten über die Tiefe und andererseits als Bandstrukturen in der Fläche widerspiegeln.

Die Ergebnisse von Kalibrierungen haben die Eigenheit, dass gleiche Ergebnisse (Grundwasserstände oder Konzentrationen) mit verschiedenen Kombinationen von Modelldatensätzen erzeugt werden können. Dies gilt besonders für stationäre Kalibrierungen, wo mit verschiedenen Kombinationen von k_f -Verteilungen und hydrologischen Randbedingungen sehr ähnliche Ergebnisse produziert werden können. Soll dieses Risiko minimiert werden, bietet sich oft die Durchführung einer instationären Kalibrierung an. Dies ist besonders dann zu empfehlen, wenn Daten von Pumpversuchen, Baugrubenabsenkungen oder ähnlichen starken 'Störungen' des natürlichen Aquiferzustandes für das Untersuchungsgebiet vorliegen.

Generell ist die Kalibrierung eines Grundwassermodells eine sehr zeit- und kostenintensive Aufgabe innerhalb des Modellierungsprozesses. Das hier vorgestellte SUFIX-Verfahren enthält implizit bereits den Kalibrierungsprozess bzw. ersetzt ihn durch die Integration eines *updating* Prozesses nach *Bayes*.

Während in SUFIX der Prozess des *updatings* zwar sehr flexibel, aber manuell erfolgen muss, existieren eine Reihe von Verfahren, die eine Automatisierung des Modifizierens von Modellparametern vornehmen. Diese werden üblicherweise zusammengefasst als inverse Verfahren bezeichnet und neben der Grundwassermodellierung in vielen anderen Bereichen der numerischen Modellierung angewendet. Kern der Verfahren ist ein Optimierungsalgorithmus, der entsprechend einer vorgegebenen Zielfunktion eine Minimierung des Gütewertes dieser Zielfunktion vor-

nimmt. Hierzu wird überwiegend der *Levenberg-Marquardt*-Algorithmus verwendet.

Die gebräuchlichen Bezeichnungen für die automatische Parameteroptimierung sind inverse Kalibrierung und Parameter-Identifizierung. Im Grundwasserbereich sind diese Verfahren jedoch im instationären Fall bisher nur für Strömungsprobleme und die rein advective Stoffausbreitung einsetzbar.

Ein genereller Nachteil dieser Verfahren liegt weiterhin darin, dass das sichere Auffinden eines globalen Optimums der Modellparameter nicht gewährleistet ist. Beim SUFIX-Verfahren ist dagegen sichergestellt, dass das globale Optimum innerhalb weniger Iterationsschritte erreicht wird (ABBASPOUR, 1997). Weiterhin ist es bei den traditionellen inversen Verfahren nicht möglich, *soft data* zu integrieren, im Gegensatz zu dem hier vorgestellten Ansatz.

In dieser Arbeit wird das *Trial and Error*-Verfahren als Vergleichsverfahren zur Beurteilung der relativen Güte der eingesetzten Verfahren verwendet.

3

Fallstudie 1: Ehemaliges Raffinerie-Gelände

Die Gliederung der Kapitel zu den Fallbeispielen orientiert sich an dem prinzipiellen Ablauf der Bearbeitung, wie er in Abbildung 2-13 auf Seite 55 zusammengefasst dargestellt ist. Zuerst wird in den Abschnitten 3.1 bis 3.3 der als deterministisch geprägt zu bezeichnende Teil der Beispiele beschrieben, so wie dies in der traditionellen Modellbearbeitung üblich ist (rechter Ast der Abbildung 2-13). Anschließend werden die für die Anwendung des SUFIX-Verfahrens zusätzlich notwendigen Arbeiten im Abschnitt 3.4 dargestellt. Das Kapitel wird abgeschlossen mit einer Wertung der Ergebnisse im Abschnitt 3.5.

3.1 Datenauswertung

3.1.1 Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet wird durch eine ehemalige Erdölraffinerie geprägt, die für eine Kontamination des Untergrundes mit verschiedenen Kohlenwasserstoffen im ungesättigten und gesättigten Bereich verantwortlich ist. Das Kohlenwasserstoffgemisch bestand hauptsächlich aus Benzol, Toluol und Xylenen. Die insgesamt versickerte Menge wurde auf 3000 - 4000 m³ geschätzt, so dass ein Großteil der Kohlenwasserstoffe ungelöst in Phase auf der Grundwasseroberfläche aufschwamm und dort abgepumpt werden konnte.

Zur Lage des Gebietes siehe Abbildung 3-1. Im Zuge der Sanierungsmaßnahme wurde ein Tracerversuch über einen Zeitraum von etwa 100 Tagen durchgeführt. Für die zu behandelnden Fragestellungen erschien der Standort auch deshalb besonders geeignet, weil auf einer kleinen Fläche (ca 0.25 km²) eine hohe Dichte an Erkundungsbohrungen und Messstellen vorliegt (s. Abbildung 3-2). Auf der in unmittelbarer Flussnähe gelegenen Untersuchungsfläche bestehen Einrichtungen für eine hydraulische Sanierung des Raffineriegeländes. Die Sanierung erfolgt über einen Wasserkreislauf, indem an 3 Sickergalerien konstant unbelastetes Wasser infiltriert wird und über Brunnen nach unterschiedlicher Fließzeit im Untergrund wieder abgepumpt und gereinigt wird. Die Maßnahme könnte man als 'Spülung' des Untergrundes charakterisieren. Der engere Sanierungsbereich ist in Abbildung 3-2 dargestellt.

3.1.2 Geologische Verhältnisse

Die geologische und hydrogeologische Erkundungslage im Bereich des ehemaligen Raffineriegeländes kann als sehr gut bezeichnet werden. Es existieren 144 verwertbare Bohraufschlüsse, die relativ gleichmäßig über das gesamte Feld verteilt

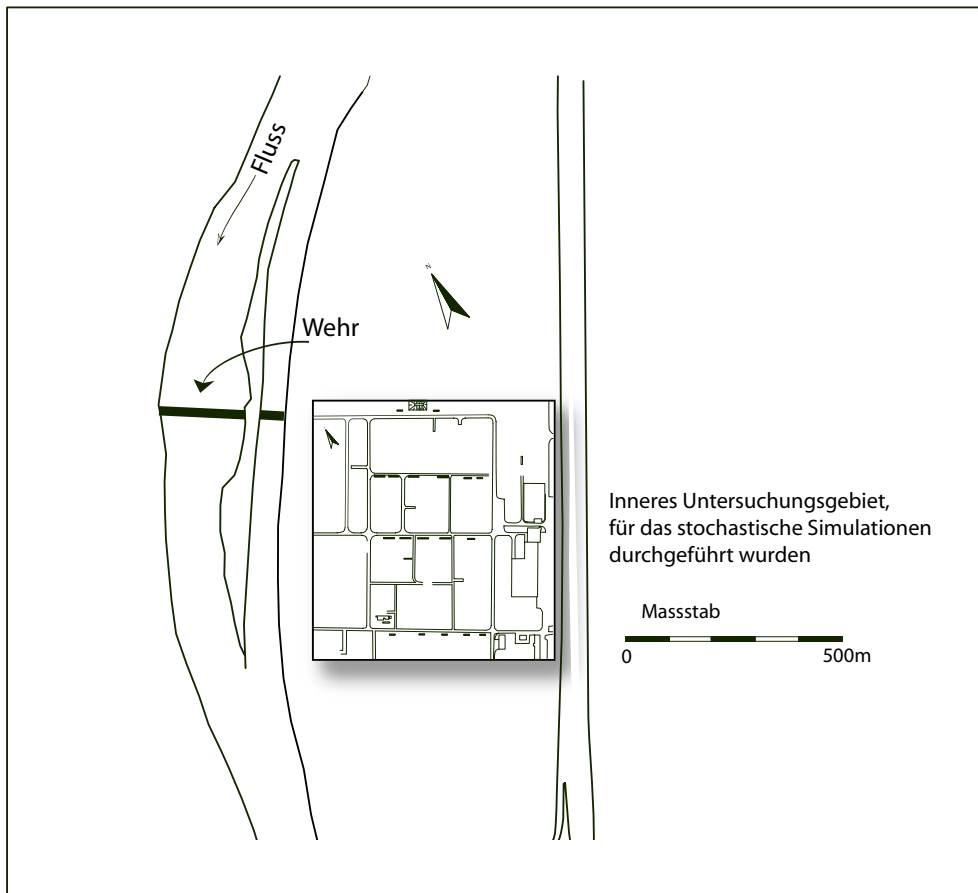


Abbildung 3-1: Lage des Untersuchungsgebietes

sind (s. Abbildung 3-2). Bezogen auf die Kernfläche (Aussagegebiet mit den Abmessungen 500 m*600 m) ergibt sich eine sehr hohe Aufschlussdichte von ca. 6 Bohrungen/ha.

Man kann die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse im interessierenden quartären Grundwasserleiter als sehr heterogen bezeichnen. In diesem Horizont ist anhand einer manuellen Auswertung der Schichtenprofile keine Abgrenzung von größeren Strukturen möglich. Die allgemeine geologische Situation im Untersuchungsgebiet zeigt Abbildung 3-3, wobei die in den nachstehenden Abbildungen gezeigten Bohrprofile nur die obersten 20m des Querschnitts erfassen, die hier zusammengefasst als Hauptaquifer dargestellt sind. Ein Beispiel für einen Querschnitt rechtwinklig zu dem angrenzenden Fluss zeigt Abbildung 3-4, während Abbildung 3-5 einen Schnitt in Längsrichtung darstellt. Zur Lage der Schnitte siehe Abbildung 3-2.

Im Jahre 1996 wurden 38 Bohrungen entlang 6 Transekten im Trockenbohrverfahren mit einem Durchmesser von 178 mm niedergebracht. Im einzelnen handelt es sich dabei um:

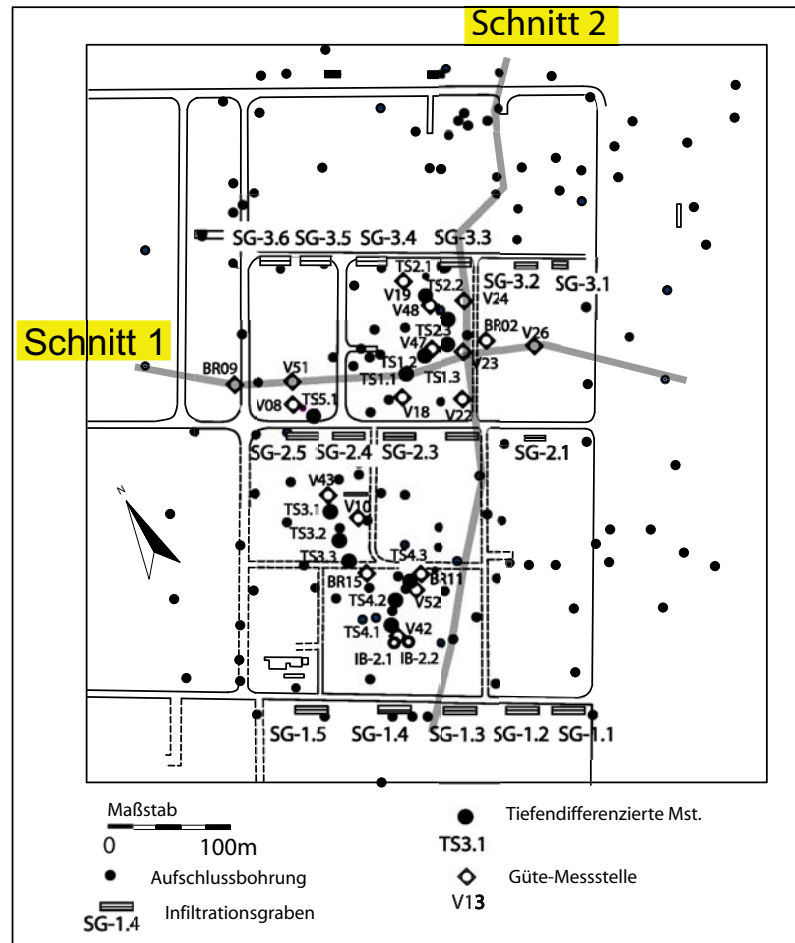


Abbildung 3-2: Lage der Aufschlussbohrungen

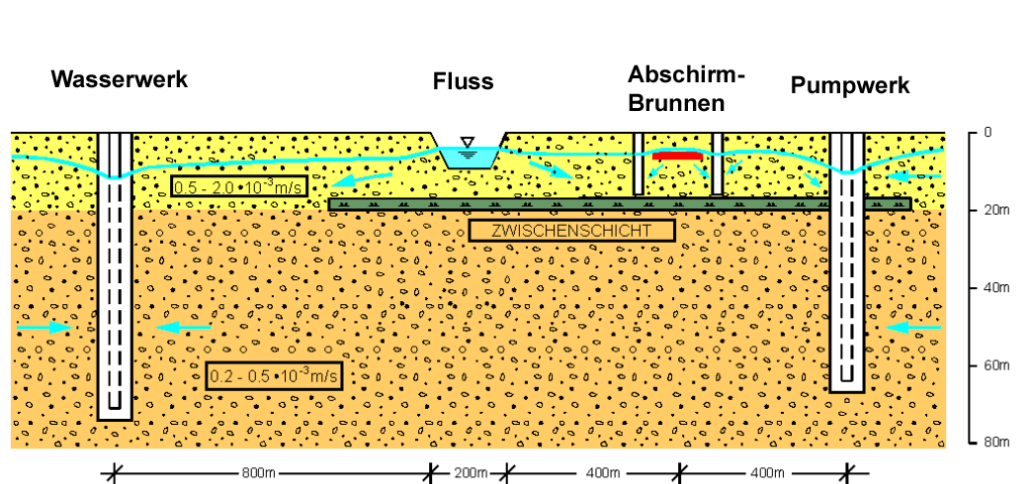


Abbildung 3-3: Schematische Geologische Situation im Untersuchungsgebiet.

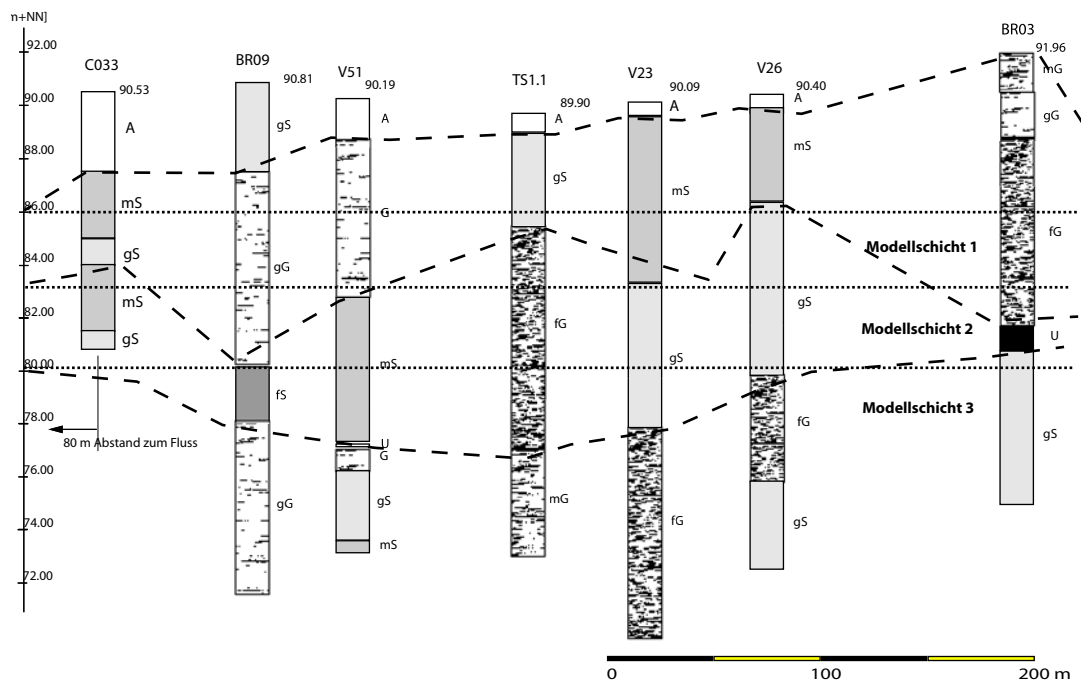


Abbildung 3-4: Bohrprofile entlang Schnitt 1

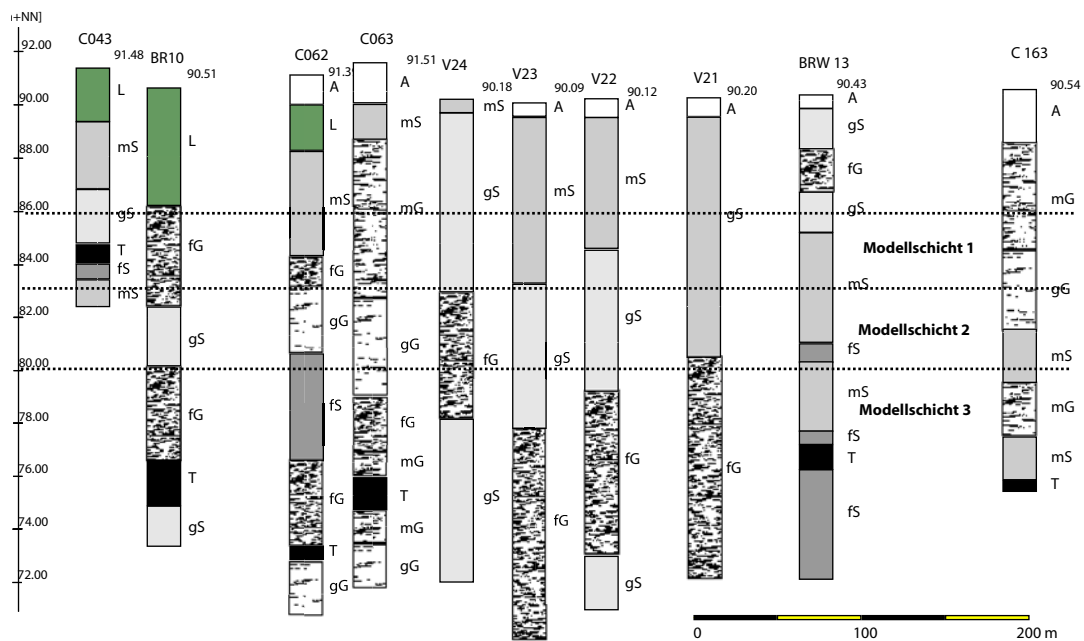


Abbildung 3-5: Bohrprofile entlang Schnitt 2

- 10 Aufschlussbohrungen zur Probenahme bis 10 m unter Geländeoberkante (GOK).
- 14 Bohrungen zur Probenahme und späterem Ausbau bis 8 m unter GOK. Diese Messstellen werden im Folgenden als Flachmessstellen bezeichnet, die Kurzbezeichnung der Messstelle endet mit einem 'F'.
- 14 Bohrungen zur Probenahme und späterem Ausbau bis 12 m unter GOK. Diese Messstellen werden im Folgenden als Tiefmessstellen bezeichnet, die Kurzbezeichnung der Messstelle endet mit einem 'T'.

Tief- und Flachmessstellen jedes tiefendifferenzierten Messstellenpaares befinden sich jeweils in einem Abstand von ca. 2 m und sind als Doppelmessstelle zur Erfassung des oberen belasteten und des tieferen unbelasteten Aquiferbereiches angeordnet.

3.1.3 Tracerversuch

Als Tracerstoffe wurden Bromid und Uranin eingesetzt. Bromid stellte hierbei den Haupttracer dar, da es praktisch keiner Sorption und keinem biologischen Abbau unterliegt. Zur Differenzierung des Zustromes zu einzelnen Grundwassermessstellen wurde als zweiter Tracer Uranin eingesetzt. Als Haupttracer kam Uranin nicht in Frage, da bei einem früher hier durchgeführten Tracerversuch ein Abbau des Uranins zu beobachten war. Als Hintergrundbelastung innerhalb des Spülfeldes wurden Bromidgehalte unterhalb der Nachweisgrenze von 0.02 mg/l sowie Uraningehalte im Bereich von 0.02 bis 0.03 mg/l ermittelt. Die Hintergrundbelastung mit Uranin wurde auf frühere Tracerversuche zurückgeführt. Die Zugabe des Tracers erfolgte als angenährtes Rechteck-Impulssignal, wobei die Tracerstoffe über eine Dauer von 24 Stunden dem Infiltrationswasser zudosiert wurden. Die Dosierung von Bromid und Uranin wurde zeitlich geringfügig versetzt durchgeführt. Bromid wurde mit einer Infiltrationskonzentration von 100 mg/l in die Infiltrationseinrichtungen IB-2.1, IB-2.2, SG-2.2, SG-2.3, SG-2.4, SG-2.5, SG-3.3 und SG-3.4 zugegeben. Uranin wurde mit einer mittleren Konzentration von 700 mg/l zwei Tage später den Infiltrationsstellen IB-2.2, SG-2.2, SG-2.4 und SG-3.4 zudosiert. Die genaue Lage der Infiltrationsstellen ist in Abbildung 3-2 dargestellt. Eine Zusammenstellung der Infiltrationsmengen der Tracer sowie der Wasserdurchsätze der Infiltrationseinrichtungen ist in Tabelle 3-1 zu finden.

Tabelle 3-1: Tracerdosierung

Tracer:		Bromid		Uranin	
Infiltrationsstelle	Wasser-durchsatz [m ³ /h]	Dosiermenge [kg NaBr]	Infiltrationskonzentration [mg/l]	Dosiermenge [kg Uranin]	Infiltrationskonzentration [µg/l]
IB-2.1	5	15.5	100	-	-
IB-2.2	5	115.5	100	84	700
SG-2.2	25	77	100	420	700
SG-2.3	30	93	100	-	-
SG-2.4	30	93	100	504	700
SG-2.5	20	62	100	-	-
SG-3.3	25	77	100	-	-
SG-3.4	20	62	100	336	700

Ergebnisse des Tracerversuchs:

Als Beobachtungsergebnisse sind primär die gemessenen Konzentrationsganglinien von Bromid und Uranin an den einzelnen Messstellen zu verstehen (als Beispiele s. Abbildungen 3-6 bis 3-8).

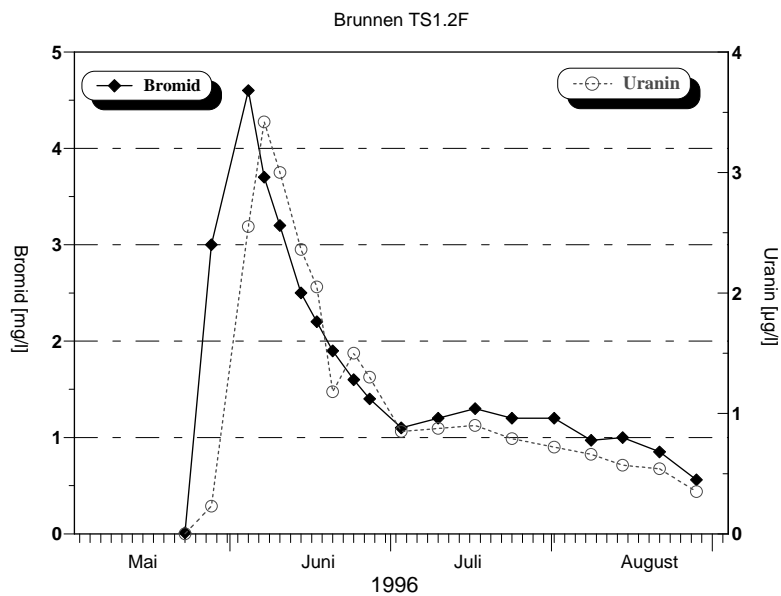


Abbildung 3-6: Konzentrationsganglinien an der Messstelle TS1.2F (Flach)

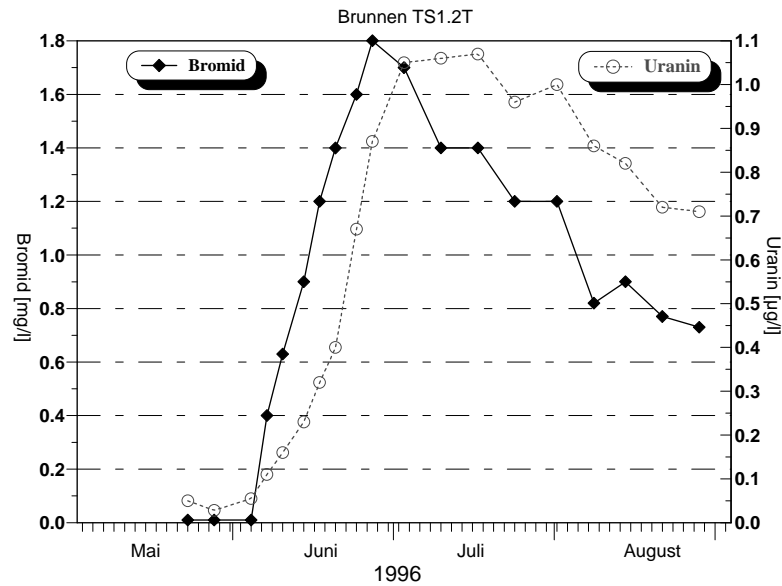


Abbildung 3-7: Konzentrationsganglinien an der Messstelle TS1.2T (Tief)}

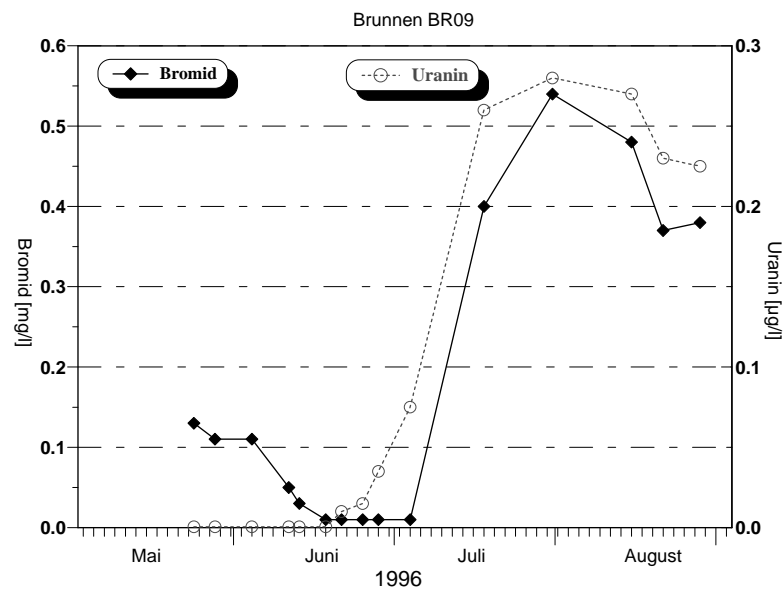


Abbildung 3-8: Konzentrationsganglinien an der Messstelle Br09

Auswertungen auf die Durchlässigkeiten des Untergrundes anhand der ermittelten Fließzeiten und der gemessenen Gefälleverhältnisse in den verschiedenen Tiefenlagen sind in Tabelle 3-2 dargestellt. Die Berechnung erfolgte entsprechend Gleichung 3.1.

Tabelle 3-2: Ermittlung der Durchlässigkeiten

Tran-sect	Zeit: Mai-Aug. 1996		Flach			Tief		
1	Infiltration: SG-2.3		1.1	1.2	1.3	1.1	1.2	1.3
	L	m	55	75	95	55	75	95
	Δs	m	0,30*	0.11	0.14	0,25*	0.02	0.09
	t_m	d	7	14	72	9	37	50
	$V_{m, ges}$	m/d	7.9	5.4	1.3	6.1	2.0	1.9
	$k_{f, ges}$	10^{-3} m/s	4.2	2.8	0.7	3.9	1.6	1.5
	$V_{m, teil}$	m/d	7.9	2.9	0.3	6.1	0.7	1.5
	$k_{f, teil}$	10^{-3} m/s	4.2	1.5	0.1	3.9	2.1	1.0
2	Infiltration: SG-3.3		2.1	2.2	2.3	2.1	2.2	2.3
	L	m	20	35	60	20	35	60
	Δs	m	0,27*	0.18	0.13	0,15*	0.09	0.1
	t_m	d	17	43	30	17	30	30
	$V_{m, ges}$	m/d	1.2	0.8	2.0	1.2	1.2	2.0
	$k_{f, ges}$	10^{-3} m/s	0.3	0.2	0.6	0.5	0.5	1.0
	$V_{m, teil}$	m/d	1.2	0.6	+	1.2	1.2	+
	$k_{f, teil}$	10^{-3} m/s	0.3	0.1	+	0.5	0.6	+
3	Infiltration: SG-2.4		3.1	3.2	3.3	3.1	3.2	3.3
	L	m	60	85	100	60	85	100
	Δs	m	0,20*	0.05	0.09	0,25*	0.07	0.05
	t_m	d	7	24	34	9	50	34
	$V_{m, ges}$	m/d	8.6	3.5	2.9	6.7	1.7	2.9
	$k_{f, ges}$	10^{-3} m/s	7.4	3.5	2.5	4.6	1.3	2.3
	$V_{m, teil}$	m/d	8.6	1.5	1.5	6.7	0.6	+
	$k_{f, teil}$	10^{-3} m/s	7.4	2.1	0.7	4.6	0.6	+
4	Infiltration: IB-2.1/2		4.1	4.2	4.3	4.1	4.2	4.3
	L	m	15	35	55	15	35	55
	Δs	m	0,12*	0.18	0.18	0,03*	0.05	0.4
	t_m	d	9	13	17	9	20	13
	$V_{m, ges}$	m/d	1.7	2.7	3.2	1.7	1.8	4.2
	$k_{f, ges}$	10^{-3} m/s	0.6	0.9	1.1	2.4	2.2	1.4
	$V_{m, teil}$	m/d	1.7	5.0	5.0	1.7	1.8	+
	$k_{f, teil}$	10^{-3} m/s	0.6	1.6	1.6	2.4	2.1	+

Erläuterung der Symbole:

L	Fließweg
Δs	Grundwasserstandsdifferenz zur vorhergehenden Messsstelle
t_m	mittlere Fließzeit nach Tracermaximum
$V_{m, ges}$	mittlere Fließgeschwindigkeit für Gesamtstrecke
$k_{f, ges}$	Durchlässigkeitsbeiwert für Gesamtstrecke
$V_{m, teil}$	mittlere Fließgeschwindigkeit für Teilstrecke
$k_{f, teil}$	Durchlässigkeitsbeiwert für Teilstrecke
+	Auswertung nicht sinnvoll, da Messsstelle nicht auf Fließlinie liegt
0,12*	geschätzter Wert

$$k_f = -\frac{n \cdot v}{\text{grad } h} \quad (3.1)$$

mit:

k_f	=	Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]
n	=	Porosität [-]
v	=	Abstandsgeschwindigkeit nach Tracerversuch [m/s]
$\text{grad } h$	=	Gefälle entlang des Transekts [-]

Berechnet wurden die k_f -Werte sowohl bezogen auf die gesamte Fließstrecke entlang des Transektes von der Eingabestelle bis zur Messstelle als auch über Teilstrecken zwischen den aufeinanderfolgenden Messstellen des Transekts³².

Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die Werte aus dem Tracerversuch jeweils einen integralen Wert für den Fließpfad darstellen, der keinen unmittelbaren Rückschluss auf die Durchlässigkeiten der einzelnen geologischen Formationen zulässt. Die Werte für einzelne Schichten können bzw. müssen also nach oben oder unten gegenüber dem relativ schmalen Wertebereich der Tracerversuchsergebnisse (0.1 bis 7.4×10^{-3} m/s) abweichen.

Im Hinblick auf die Vorstellungen über die Heterogenität des Gebietes ist interessant, dass sich bei einzelnen Transektabschnitten rechnerisch negative k_f -Werte ergeben. Das bedeutet, dass die Fließzeit zu einer weiter entfernt gelegenen Messstelle kürzer ist, als zu näheren Messstellen. Dies kann als starker Hinweis auf *channeling*-Effekte gesehen werden. Betroffen davon sind die Transekte 2, 3 und 4. In den sonstigen Bereichen liegen die k_f -Werte in der Größenordnung 1 bis 7×10^{-3} . Die im Tracerversuch ermittelten Werte sind gegenüber Werten aus Siebanalysen, Laborversuchen oder Kleinpumpversuchen als zuverlässiger einzustufen, da mit ihnen das großräumige Fließgeschehen erfasst wird.

32. Diese k_f -Werte werden als *hard-data* in den in Kapitel 3.4 erläuterten Unsicherheitsbetrachtungen eingesetzt.

3.2 Hydrogeologisches Modell

Nach der Sichtung und Auswertung der Unterlagen besteht der nächste Schritt bei der Erstellung eines deterministischen numerischen Grundwassermodells darin, ein hydrogeologisches Modell des Untergrundaufbaus und der hydraulischen Zusammenhänge und Abhängigkeiten zu entwerfen. Praktisch bedeutet dies eine erste Festlegung der Verteilung von k_f -Werten (hydraulische Durchlässigkeiten) sowohl in der Fläche als auch in der Tiefe. Bei der hier eingesetzten Methode der stochastischen Generierung der Durchlässigkeitsfelder ergibt sich theoretisch dieses Modell zwangsläufig als Ergebnis dieser Simulationen. Durch die geologische Besonderheit der Anisotropie³³ (neben anderen nur deterministisch zu beschreibenden Eigenschaften) dieser Felder treten in der Praxis jedoch Probleme auf. Es ist vielfach sinnvoller, die aus geologischen Aufschlüssen für den Fachmann erkennbaren Schichtgrenzen *a-priori* vorzugeben, anstatt diese als Zufallsgrößen zu betrachten. Diese Vorgehensweise wurde auch hier gewählt, so dass die Durchlässigkeitsfelder schichtweise getrennt mit ihren spezifischen geostatistischen Kennwerten simuliert wurden. Zusammengefasst standen für die Erstellung des hydrogeologischen Modells folgende Daten zur Verfügung:

1. Hydraulische Durchlässigkeiten aus der Auswertung eines Tracerversuchs (als *hard data* angesehen).
2. Aus den Bohrprofilen (Bohransprachen) abgeleitete hydraulische Durchlässigkeiten. Da diese Werte naturgemäß mit einer als hoch anzusehenden Unsicherheit behaftet sind, werden die Werte im folgendem als *soft data* betrachtet.
3. Hydrologische Daten (Grundwasserstände, Flusswasserstände, Grundwasserneubildung). Diese Daten wurden als *hard data* angesehen und nicht in das SUFIX Verfahren einbezogen.
4. Daten zu äußeren Störungen des Grundwasserregimes (Brunnenentnahmen und -infiltrationen). Diese Daten wurden ebenfalls als sichere *hard data* angesehen.
5. Chemische Daten (Tracer-Konzentrationen). Auch hier wurden die Messungen in zwei verschiedenen Tiefen vorgenommen. Die Messungen wurden als *hard data* betrachtet, obwohl bekannt ist, dass Analysenergebnisse im Einzelfall eine hohe Unsicherheitsspanne aufweisen können.

Wie die Untergrundprofile (Abbildungen 3-4 und 3-5) zeigen, existiert keine deutlich erkennbare Trennung in durchgehende Horizonte oder Stockwerke. Aus den Grundwasserstandsmessungen ist jedoch abzuleiten, dass ein Potentialunterschied zwischen tiefen und flachen Messstellen von bis zu 40 cm vorhanden ist. Da zudem die Tracermessungen auch in zwei Tiefen vorgenommen wurden (Abschnitt 3.1.3), wird eine Differenzierung in vier Schichten als sinnvoll angesehen. Wegen der hohen Heterogenität des Untergrundes erfolgte die Festlegung der Modellschichten nicht durch eine Abgrenzung von hydrogeologisch wirksamen

33. Die Durchlässigkeit in der Vertikalen ist um einen Faktor (etwa 2 bis 10) geringer als in der Horizontalen, bedingt durch den geologischen Schichtaufbau eines Lockergesteinsaquifers

Schichten, sondern musste anhand einer statistischen Auswertung der generierten *soft data* vorgenommen werden. Siehe hierzu die Abbildungen 3-10 bis 3-12, die für die maßgebenden Modellschichten 1 bis 3 die Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte angeben (ein Vorgriff auf die Generierung der *soft data*, die erst in Abschnitt 3.4.1 beschrieben wird).

Für die Rechnungen mit stochastisch simulierten Durchlässigkeitsverteilungen wurden insgesamt drei Modellschichten berücksichtigt. Die hydraulischen Durchlässigkeiten der untersten vierten Schicht werden in allen Rechnungen nicht verändert. Die Schicht dient nur dazu, die Förderung eines Brunnens aus dieser Tiefe adäquat zu berücksichtigen. Die vertikale Modellschichtung sieht demnach wie in Tabelle 3-3 angegeben aus.

Tabelle 3-3: Vertikaler Modellaufbau

Geodätische Höhe [m+NN]	Charakterisierung	Modellschicht
über 88	hoher Feinkornanteil	- (ungesättigt)
86-88	Übergang zu grobem Material	- (ungesättigt)
83-86	geringer Feinkornanteil, relativ grob	1 (Grundwasseroberfläche liegt in dieser Schicht)
80-83	höherer Feinkornanteil, Linsen mit geringer Durchlässigkeit, bewirkt bereichsweise hydraulische Trennung	2
70-80	geringer Feinkornanteil, grob	3
50-70	2. Grundwasserstockwerk, hohe Entnahmen, ohne Belang für Tracerausbreitung, da zu oberem GW-Stockwerk abgetrennt (Abbildung 3-3). Diese Schicht wird nicht stochastisch simuliert.	4

Für die Vergleichsrechnungen (s. Abschnitt 3.4.7) ohne Einbeziehung einer stochastischen Komponente und der *soft data* wurde auf ein stark vereinfachtes hydrogeologische Modell zurückgegriffen, in dem die Heterogenitätsabbildung durch eine manuelle Zonierung nur unter Zuhilfenahme der *hard data* vorgenommen wurde. Weiterhin wurde nur noch eine Modellschicht vorgesehen, um die Auswirkungen einer starken Vereinfachung des Hydrogeologischen Modells auf die Aussagesicherheit zu quantifizieren.

Die Ermittlung der hydraulischen Durchlässigkeiten wurde für die *hard data* im Abschnitt 3.1.3 behandelt. Die Ermittlung der *soft data* aus den Bohrbeschreibungen wird im Abschnitt 3.4.1 beschrieben werden.

3.3 Numerisches Modell

Für die numerischen Strömungsberechnungen wurde die Software MODFLOW (MCDONALD & HARBAUGH, 1988) zum Teil zusammen mit dem Prä- und Postprozessor VISUAL MODFLOW (WATERLOO HYDROGEOLOGIC, 2000) eingesetzt. Für die Ausbreitungsrechnungen wurde das Programm MT3D (ZHENG, 1992) verwendet, das die Ergebnisdateien der Strömungsmodellierung aus MODFLOW direkt übernehmen kann.

Die **Strömungsmodellierung** wurde stationär unter gemittelten hydrologischen Bedingungen und äußeren Störungen durchgeführt. Als maßgebend für die Mittelung der hydrologischen Modellrandbedingungen wurde der Zeitraum Herbst 1996 bis Frühjahr 1997 angesehen. Die Grundwasserstände wurden während des Tracerversuchs an den gleichen Messstellen wie die Konzentrationen gemessen. Die Schwankungen in diesem Zeitraum betrugen etwa 15-20 cm. Für die Untersuchungen wurde mit einem gemittelten Wasserstand gearbeitet. Durch den Ausbau der Messstellen in verschiedenen Tiefen standen jeweils zwei tiefenabhängige Wasserstandsmessungen zur Verfügung. Die Wasserstandsdifferenzen zwischen den Messungen in verschiedenen Tiefen betrugen bis zu 52 cm (höhere Wasserstände bei der Flachmessung), wobei jedoch im Mittel deutliche geringere Differenzen gemessen wurden.

Einen Modellrand bildet der Fluss, durch den eine deutliche hydraulische Beeinflussung der Grundwasserverhältnisse, bedingt durch seine Größe, gegeben ist. Die hydraulische Kopplung zwischen Flusswasserspiegel und der Grundwasseroberfläche an den Randknoten wird hier mittels eines Leakage-Koeffizienten gesteuert. Der Leakage-Koeffizient stellt dabei einen Proportionalitätsfaktor in der einfachen linearen Beziehung zwischen der Potentialdifferenz von Flusswasser- und Grundwasserspiegel dar.

Für die restlichen Randknoten wurden Festpotentiale vorgegeben, die über eine Mittelwertbildung für den gewählten Zeitraum gewonnen wurden. Eine Rückwirkung der Festpotentiale auf die Grundwasserstände im eigentlichen Aussagebereich des Modells kann weitestgehend ausgeschlossen werden, da die Ränder weit vom Kernbereich des Modells entfernt liegen, ein konstanter Flusswasserspiegel und eine konstante Grundwasserneubildung angenommen wird und die Reichweite der Entnahme- und Versickerungsorgane nicht über den Kernbereich (Bereich mit größter Netzverdichtung in Abbildung 3-9) hinausgehen.

Das System wird zum einen durch die Infiltrationsgräben für die Zugabe des Tracers kontrolliert, und zum anderen durch die Förderbrunnen, die den Kreislauf für die hydraulische Sanierung des Geländes sicherstellen sollten. Hinzu kamen sonstige Brunnen, die außerhalb des Versuchsgeländes lagen, die Strömungsverhältnisse aber mit beeinflussten. Diese Daten wurden ebenfalls wie die anderen Entnahmen als sicher angesehen.

Im Kernbereich des Modells existiert eine Vielzahl von Entnahmen, die ebenfalls gemittelt berücksichtigt wurden. Da die Modellbereiche außerhalb des interessierenden Kernmodells im Wesentlichen nur zur sauberen Definition von Randbedingungen dienen, wurde in diesen Außenbereichen auf eine Simulation der

Durchlässigkeitsverteilungen verzichtet. Das heißt, dass hier für sämtliche Modellrechnungen ein konstantes k_f -Wert-Feld angenommen wurde. Die k_f -Werte wurden hier aus einer vorgeschalteten stationären Kalibrierung übernommen.

Die instationäre **Ausbreitungsberechnung** erstreckt sich über einen Zeitraum von 100 Tagen, was etwa der Dauer des Tracerversuchs entspricht. Die Zeitschrittlänge beträgt dabei max. eine Stunde, so dass sich insgesamt pro Rechenlauf mindestens 2400 Zeitschritte ergeben.

Die gewählte Diskretisierung in der Fläche zeigt Abbildung 3-9. Die Größe der 'Modellblöcke' (räumliche Diskretisierung) beträgt im Randbereich 80 m und verringert sich bis zum eigentlichen Untersuchungsbereich auf 10 m. Die Gesamtfläche des Modells beträgt ein Vielfaches der Fläche des eng beprobten und untersuchten inneren Kernbereiches. Die Modellränder mussten jedoch an grundwasserhydraulisch definierte Randbedingungen angepasst werden, wobei hier besonders der Fluss mit einer Staustufe zu nennen ist, der einen prägenden Einfluss auf das großräumige Strömungsgeschehen ausübt.

3.4 Anwendung des SUFIX-Verfahrens zur Unsicherheitsanalyse

Das SUFIX-Verfahren wurde entsprechend dem in Abschnitt 2.7 beschriebenen Ablauf angewendet. Es wurden vier differierende Propagationpfade für die Unsicherheiten der Eingangsdaten gewählt, deren Ergebnisse miteinander verglichen und bewertet wurden. Je nach Pfad unterschieden sich die eingesetzten Methoden für die konkrete Anwendung der Schritte SUFIX1 bis SUFIX 4. In allen Anwendungen gleich ist lediglich das Verfahren zur Generierung der *soft data* aus den Bohrbeschreibungen (Abschnitt 3.4.1), als SUFIX1A bezeichnet.

Als Vergleichsrechnungen zu den Untersuchungen mit stochastischen Komponenten wurden Beispiele ohne Einsatz stochastischer Verfahren auf der Grundlage der manuellen Zonierung durchgeführt.

3.4.1 Generierung der *soft data* aus Bohrbeschreibungen

Nach der EDV-mäßigen Erfassung des Bestandes an Bohrbeschreibungen, wurde die in Abschnitt 2.7.3 beschriebene Prozedur zur Gewinnung von k_f -Werten aus der geologischen Aufschlussbeschreibung durchgeführt. Die notwendige Plausibilitätsprüfung erfolgte hier anhand der Auswertungsergebnisse des Tracerversuchs im Hinblick auf die k_f -Werte (s. Tabelle 3-2).

Die Häufigkeitsverteilungen der generierten Werte in den Modellschichten 1 bis 3 sind in den Abbildungen 3-10 bis 3-12 dargestellt. Die Näherung an eine Normalverteilung wurde hier als akzeptabel angesehen, so dass eine Normalisierung der Werte nicht notwendig wurde. Siehe auch Fallstudie 2, wo die bimodale Verteilung der k_f -Werte diese Konvertierung notwendig machte, um die geostatistischen Kennwerte auf Grundlage der normalisierten Daten für die nachfolgenden stochastischen Simulationen verwenden zu können.

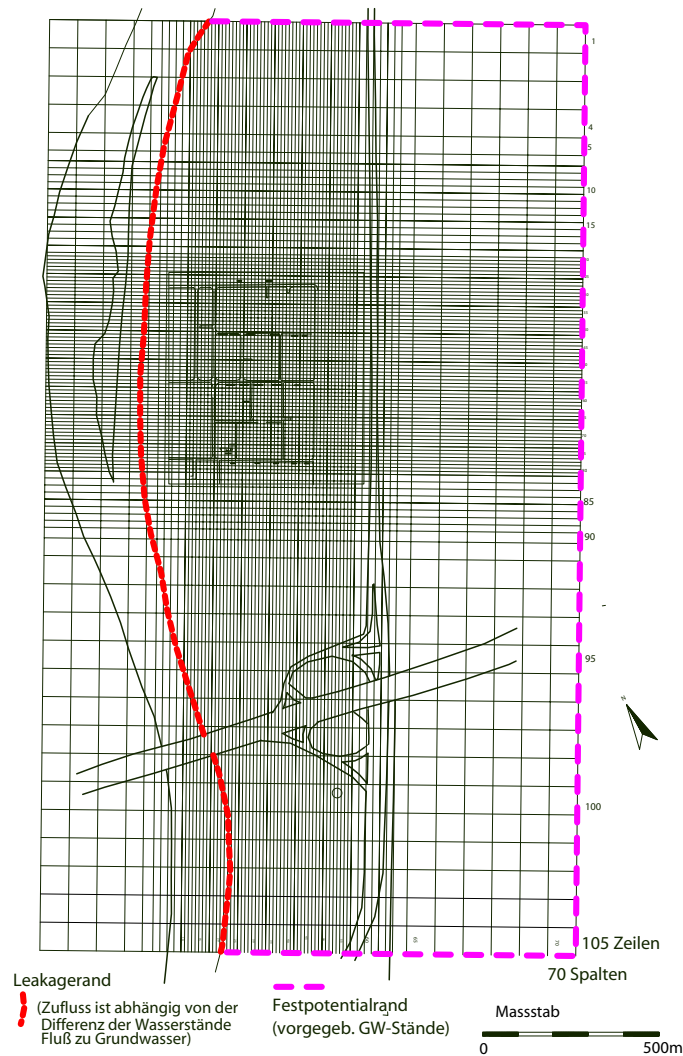


Abbildung 3-9: Räumliche Modelldiskretisierung und Randbedingungen

In Tabelle 3-4 sind die statistischen Kennwerte der Verteilungen zusammengestellt. Die Güte des k_f -Generierungs-Verfahrens kann anhand einer Korrelation zwischen den generierten Werten und den aus den Pumpversuchsdaten berechneten Werten an gleichen Punkten beurteilt werden (s. Abbildungen B-1 bis B-3 auf Seite 179).

Beschränkt man die Auswertung auf die Durchlässigkeitsbereiche, die eine modellrelevante Grundwasserströmung bzw. einen Tracertransport zulassen³⁴, ergeben sich deutlich geringere Varianzen als in Tabelle 3-4 dargestellt. Da jedoch zusammenhängende Bereiche des Aquifers die Strömungsrichtung deutlich beeinflussen können, werden in der weiteren Auswertung auch die 'Ausreißer' berücksichtigt.

34. Als 'Ausreißer' könnten folgende Werte angesehen werden: Schicht 1: 1 Wert < -9.0 , Schicht 2: 5 Werte < -10.0 , Schicht 3: 6 Werte < -10.0

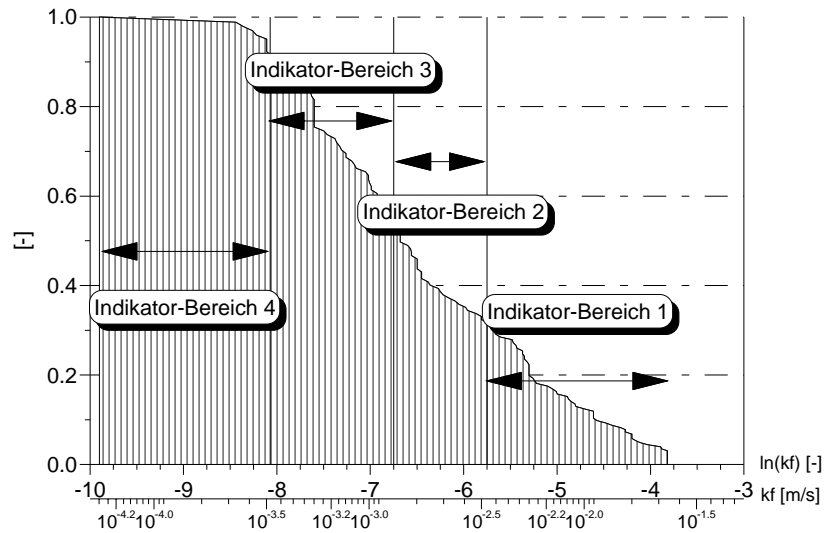


Abbildung 3-10: Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 1)

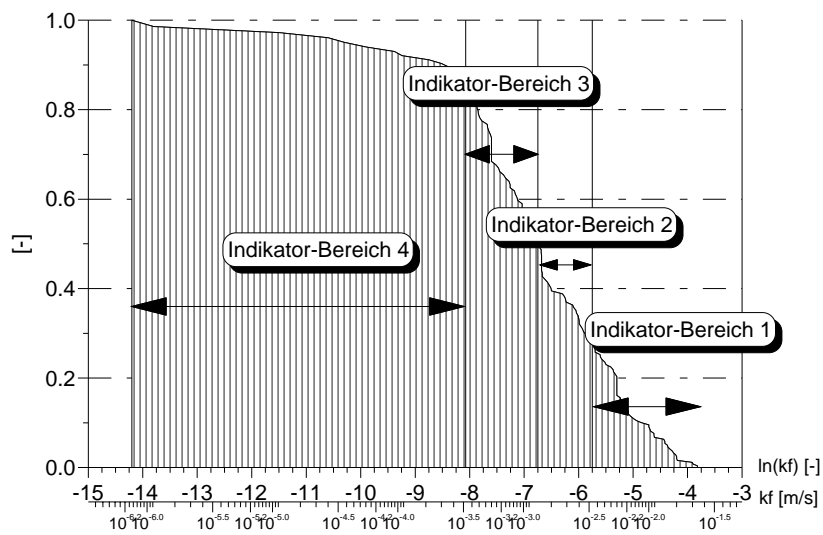


Abbildung 3-11: Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 2)

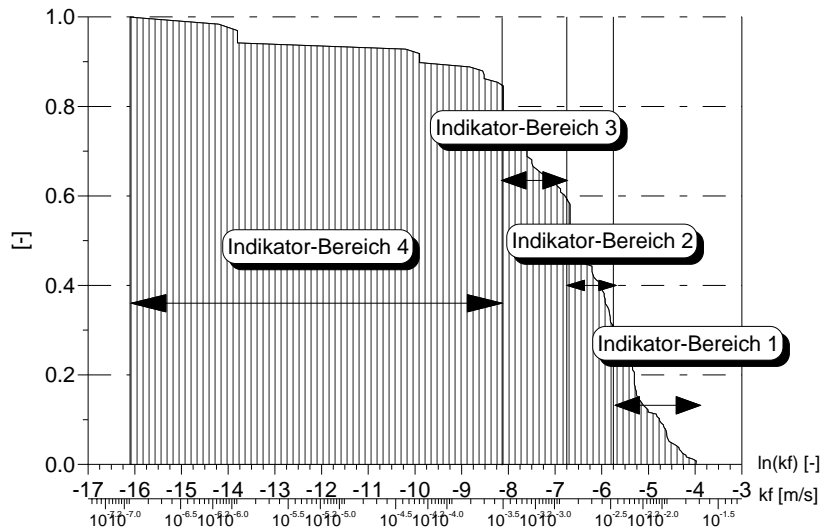


Abbildung 3-12: Häufigkeiten von $\ln(k_f)$ mit Einteilung der Indikatorbereiche (Modellschicht 3)

Tabelle 3-4: Statistische Kenngrößen der Modellschichten 1 bis 3

Modellschicht	Minimum [$\ln(k_f)$]	Maximum [$\ln(k_f)$]	Mittel (arithmetisch)	Varianz
1 (86-83 m+NN)	-9.9	-3.8	-6.2	1.8
2 (83-80 m+NN)	-14.2	-3.8	-6.5	2.7
3 (80-70 m+NN)	-16.1	-4.0	-6.5	3.8

3.4.2 Variographie

Für die Ermittlung der geostatistischen Parameter wurden die Softwareprodukte VARIOWIN (PANNATIER, 1996) und GAMV3 aus der GSLIB Bibliothek (DEUTSCH & JOURNAL, 1998) eingesetzt.

Die Variogramme für die einzelnen Modellschichten zeigen die Abbildungen 3-13 bis 3-15. Zur Überprüfung einer eventuell vorhandenen Anisotropie (Richtungsabhängigkeit) der Variogrammverläufe ist es möglich, ein Flächenvariogramm zu erstellen. Die Variogrammwerte werden hierzu, ausgehend von einem zentralen Startpunkt (0,0), für alle x,y-Richtungen berechnet. Eine Auswertung in dieser Art zeigte für keine Modellschicht die Ausprägung einer Richtungsabhängigkeit der Variogrammwerte. Bei der Generierung der stochastischen Simulationen konnte damit auf die Einbeziehung eines Anisotropieeinflusses innerhalb einer Modellschicht verzichtet werden.

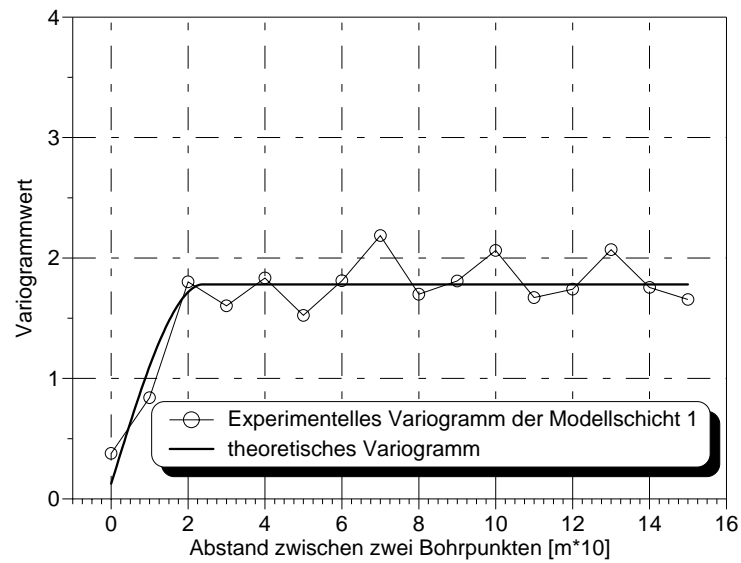


Abbildung 3-13: Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 1

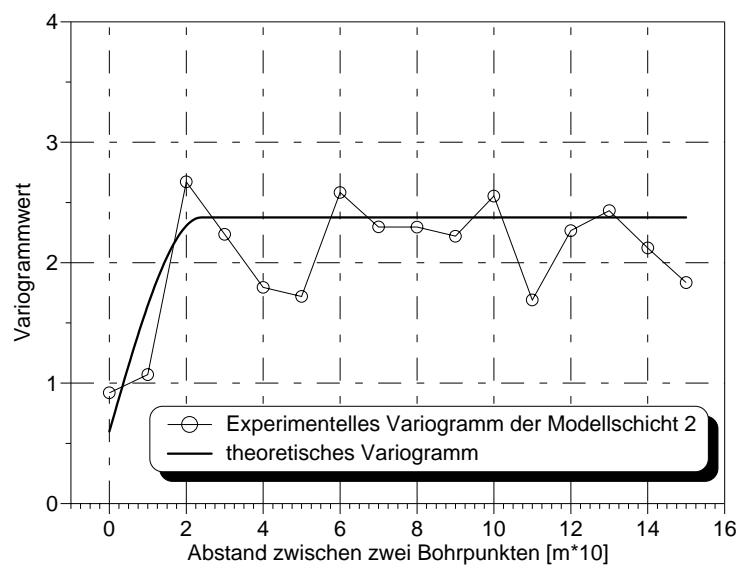


Abbildung 3-14: Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 2

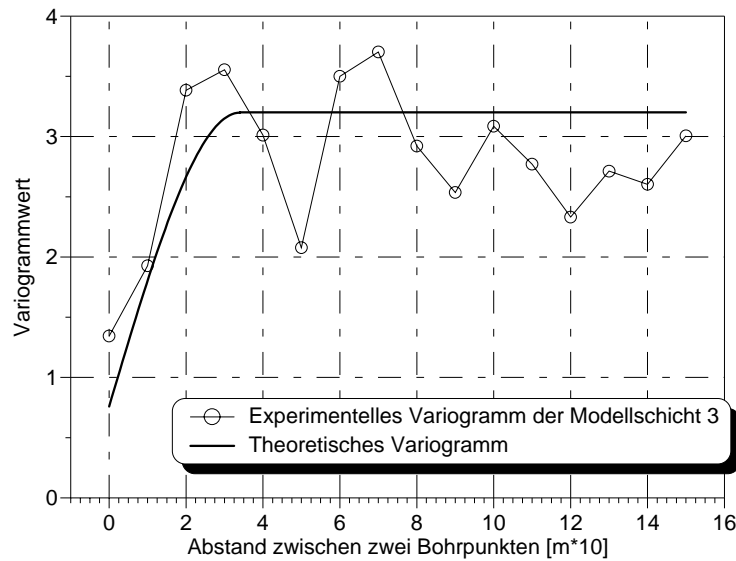


Abbildung 3-15: Experimentelles und theoretisches Variogramm für die Modellschicht 3

Tabelle 3-5 fasst die charakteristischen Parameter der geostatistischen Auswertung zusammen.

Tabelle 3-5: Variogrammparameter der Modellschichten 1 bis 3 (Sphärisches theoretisches Modell)

Modellschicht	Reichweite (range) [m]	Varianzanteil (sill) [-]	Nugget-Effekt [-]	Güte der Anpassung [-]
1 (86-83 m+NN)	24	1.66	0.13	0.025
2 (83-80 m+NN)	24	1.78	0.6	0.063
3 (80-70 m+NN)	34	2.44	0.76	0.058

3.4.3 Propagationspfad TB

Hier wird die Propagation der Unsicherheiten, ausgehend von der *soft data* Generierung an den einzelnen Bohrpunkten verfolgt. Die Heterogenitätsabbildung erfolgt hier mittels des *Turnings-Bands*-Verfahren mit der Software TB3D (DEUTSCH & JOURNAL, 1992). Die Simulationen wurden sowohl unkonditioniert als auch mit *soft data* konditioniert eingesetzt.

Die stochastischen Simulationsverfahren, die Untergrundstrukturen auf der Annahme einer kontinuierlichen Heterogenität nachbilden, erzeugen im Fall des Turnings-Bands-Verfahrens pro Modellschicht etwa 1000 verschiedene Flächen mit jeweils konstantem k_f -Wert. Es erscheint nicht sinnvoll, den Schritt SUFIX 4 (BAYES'-*sequential-updating*) direkt auf diese Flächenwerte anzuwenden und diese zu optimieren, da die notwendige Stichprobenzahl zur Unsicherheitsanalyse sehr groß sein müsste. Als Optimierungsgrößen werden stattdessen die sich aus der geo-

statistischen Analyse ergebenden Variogrammparameter, die als Generierungsparameter der Simulationen dienen, verwendet.

Die konkrete Umsetzung der in Abschnitt 2.7 beschriebenen 4 Schritte der SUFIX-Anwendung, sieht für die Fälle TB und TBC wie folgt aus (s. a. Abbildung 3-16):

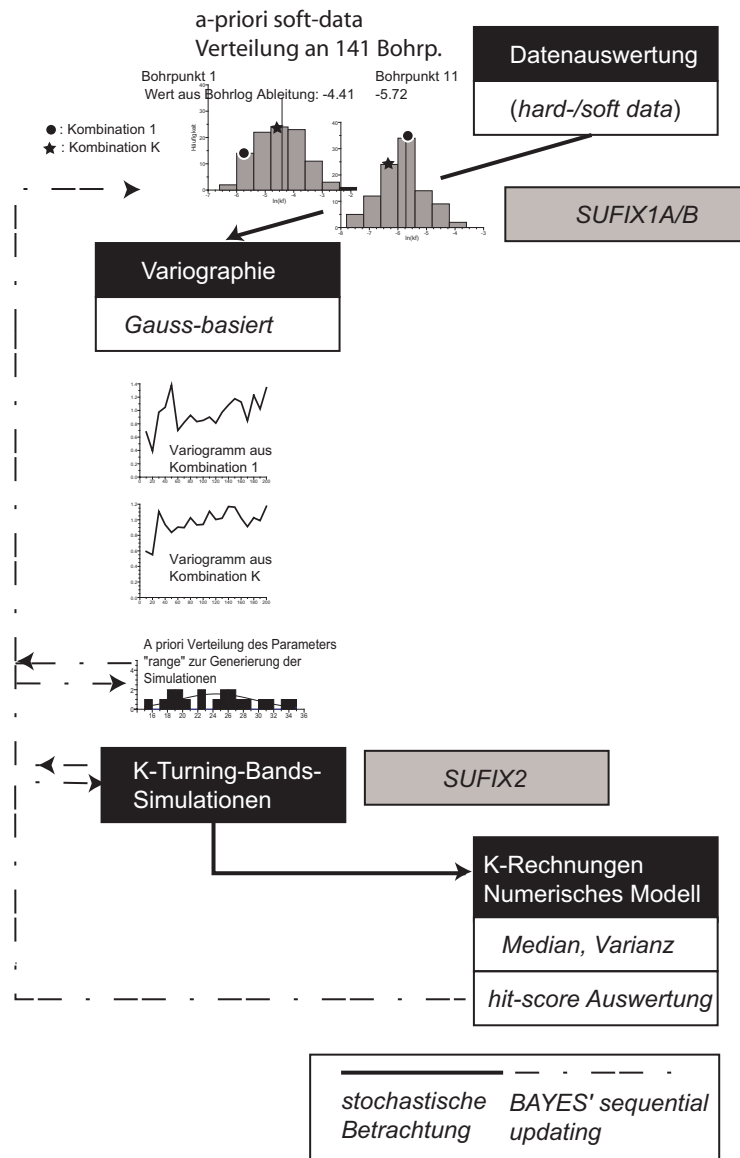


Abbildung 3-16: Prinzipieller Ablauf des SUFIX- Verfahrens mit Gauss-basierten Simulationen (vgl. mit Abbildung 2-13).

SUFFIX1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte.

SUFFIX1B: Die *soft data* k_f -Werte werden durch Einbeziehung einer Verteilung als unsichere Größen eingeführt. Für jeden Bohrpunkt wird hierzu

eine aus 100 Werten bestehende Normalverteilung generiert, die den *soft data*-Wert als Mittelwert verwendet. Die Varianz der Verteilung an den einzelnen Bohrpunkten wird mit $\sigma = 0.7^{35}$ angenommen. Es wurden drei Modellschichten berücksichtigt, so dass insgesamt 432 Verteilungen generiert wurden.

Variogramm: Daraus ergeben sich nach einer Variogrammanalyse Verteilungen für die geostatistischen Kennwerte, deren Varianzen die Fortpflanzung der Unsicherheiten aus Schritt SUFIX1B widerspiegeln. Das Ergebnis der Variogrammanalyse als Häufigkeitsverteilung der Variogrammparameter (Abbildung 3-17) stellt die erste Stufe der Fortpflanzung in den geostatistischen Kennwerten dar. Dargestellt sind 20 Auswertungen für den geostatistischen Parameter *range*, der neben *sill* und *nugget*-Effekt eine der maßgebenden Größen für die Turning-Bands Simulationen bildet.

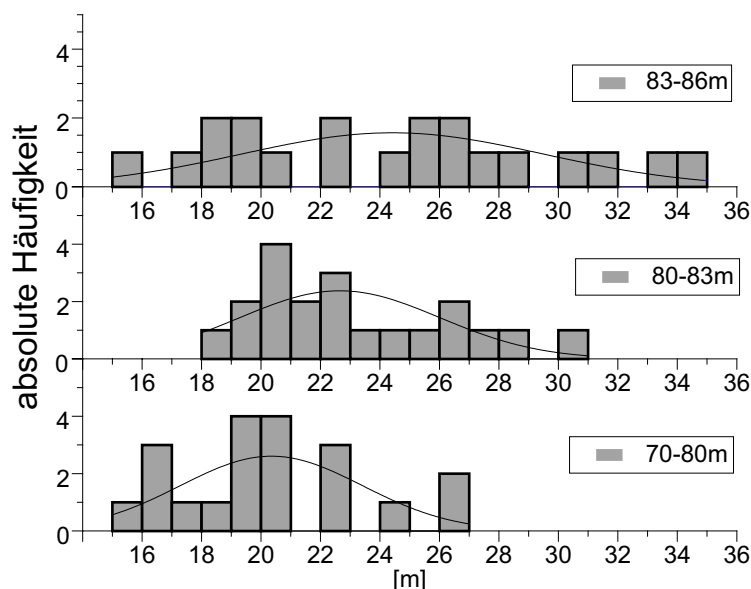


Abbildung 3-17: Fortpflanzung der Unsicherheit in den Variogramm-Reichweiten (*range* als a-priori-Verteilung für die Modellrechnungen)

SUFIX2: Mit diesem Satz an geostatistischen Kennwerten wurden für jede Schicht 20 Turning-Bands Simulationen erstellt. Ein typisches Beispiel zeigt Abbildung 3-18. Die Variation der *Turning-Bands*-Simulationen zeigt schließlich die Unsicherheit bezüglich der räumlichen Verteilung der k_F -Werte.

SUFIX3: Schritt zur Erstellung der Parameterkombinationen. Die prinzipielle

35. Dies ergibt einen Faktor 4 als Spannweite zwischen kleinstem und größtem möglichem Wert.

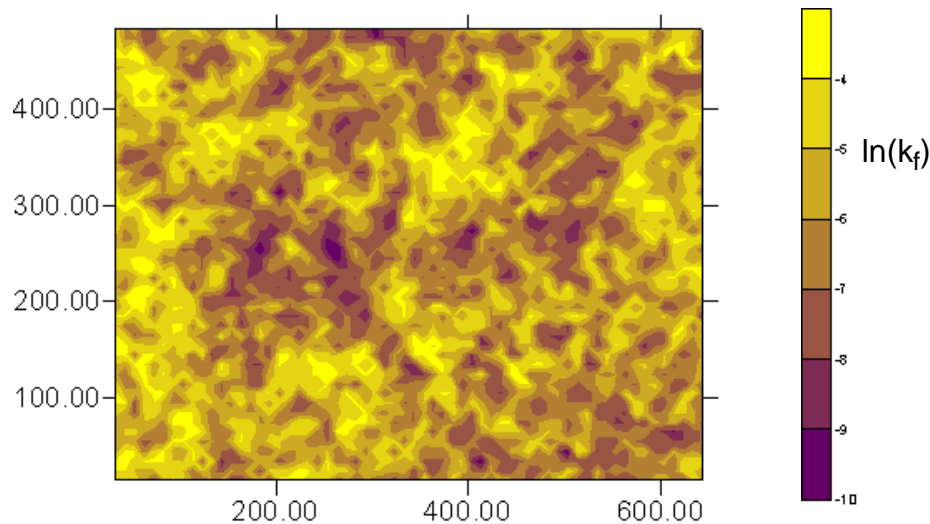


Abbildung 3-18: Turning-Bands-Simulation für $\ln(k_f)$, Schicht 1, 2. Simulation (SUFIX2)

Vorgehensweise zeigt Abbildung 3-19. Die 20 unkonditionierten Simulationen aus dem Schritt SUFIX2, zu deren Generierung lediglich die geostatistischen Variogrammparameter verwendet wurden, werden anschließend mit jeweils 5 Datensätzen aus den *soft data* Verteilungen konditioniert, so dass aus einer *Stammabbildung* der Heterogenität fünf weitere Abbildungen abgeleitet werden. Dies bedeutet, dass an den Bohrpunkten selbst ein gezogener Wert aus der *soft data* Verteilung vorliegt, und entsprechend eine höhere Übereinstimmung der generierten k_f -Verteilung mit den tatsächlichen natürlichen Verhältnissen zu erwarten ist. In Abbildung 3-20 ist ein Vergleich der generierten k_f -Werte für eine Modellzeile in der unkonditionierten *Stammabbildung* und einer davon abgeleiteten konditionierten Simulation dargestellt. Die beiden Knoten mit den größten Abweichungen sind durch Pfeile gekennzeichnet, in der flächigen Darstellungsform ist eine Differenzierung zwischen den beiden Fällen kaum möglich.

Nach dem stratifizierten Stichprobenverfahren wurden demnach $5 \cdot 20 = 100$ Kombinationen gezogen und entsprechend viele Heterogenitätsabbildungen erstellt, so dass insgesamt 100 konditionierte *Turning-Bands*-Simulationen für die Strömungs- und Transportrechnungen zur Verfügung standen.

SUFIX4: Eine Auswertung der Zielfunktion erlaubt schließlich Rückschlüsse auf die wahrscheinlichsten Werte aus den Verteilungen der Eingangsdaten. Dies ist der sog. *updating*-Schritt im SUFIX-Verfahren. Ein *updating* der Simulationen selbst ist derzeit noch nicht möglich, da das Updating nur lokal erfolgen müsste und die zugrundeliegenden geostatistischen Kennwerte erhalten bleiben müssen.

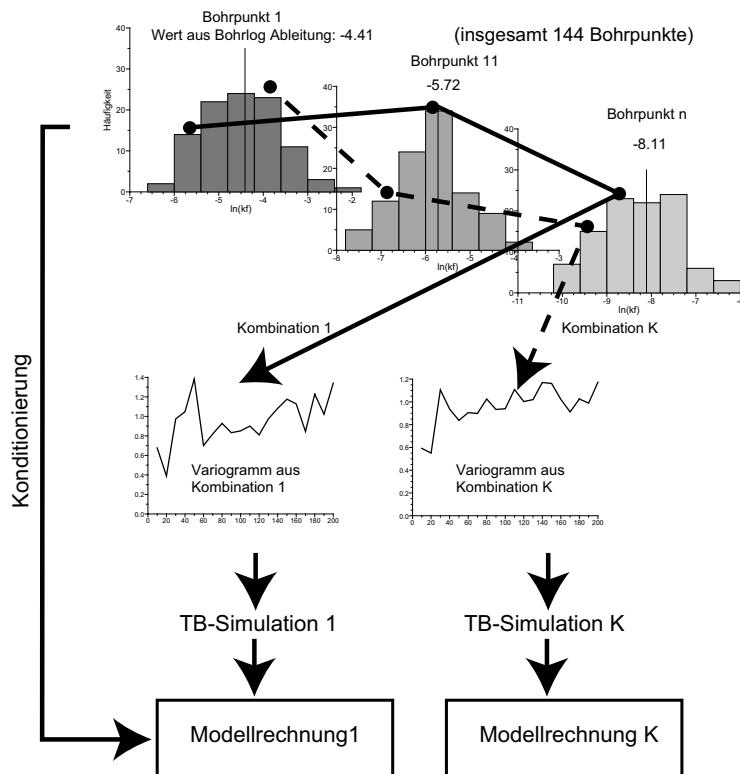


Abbildung 3-19: Schema der Parameterkombinationen im Propagationspfad TB (Schritt SUFIX3)

3.4.4 Propagationspfad TG

Das alternative Konzept der diskreten Heterogenität wurde anhand stochastischer Truncated Gauss-Simulationen getestet. Als Software wurde TRUNGA-3D (BARDOSSY, 1997) eingesetzt. Das Truncated Gauss Verfahren basiert auf einer Indikatorklassen-Einteilung der zu simulierenden Variable. Als unsicher wird hier die global gültige Klasseneinteilung angenommen und nicht die lokale statistische Verteilung der k_f -Werte an den Bohrpunkten wie im Fall TB. Indikator-basierende Verfahren verwenden üblicherweise definierte Schwellenwerte. Bei Indikator-basierten Simulationen werden statt Einzelwerten Wertebereiche verwendet, innerhalb derer die Werte als gleichverteilt angenommen werden.

Die konkrete Umsetzung des SUFIX Verfahrens für den Fall TG sieht wie folgt aus (s. a. Abbildung 3-21):

SUFIX 1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte.

SUFIX 1B: Die *soft data*- k_f -Werte wurden in jeder Modellschicht in jeweils 4 Indikatorwertebereiche eingeteilt. Die Einteilung ist in jeder Schicht

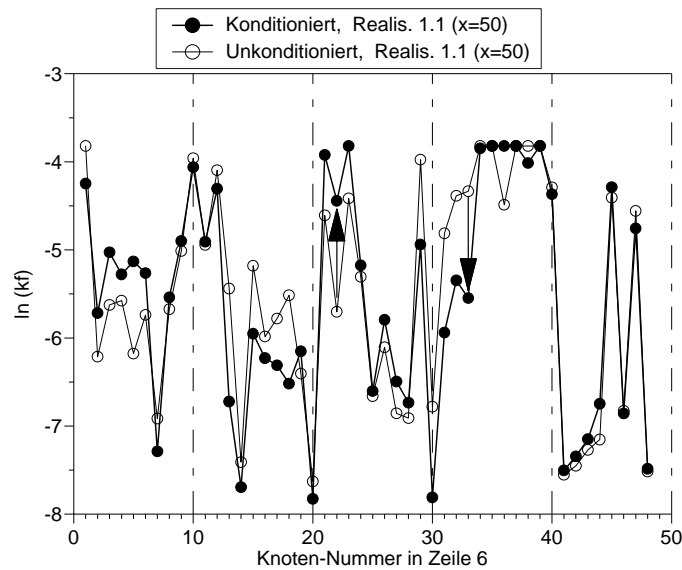


Abbildung 3-20: Vergleich zwischen konditionierter und unkonditionierter Simulation (Simulation1, Schicht 1, Zeile 6 des numerischen Modells)

identisch und wurde anhand der Häufigkeitsverteilungen der Daten vorgenommen (s. a. Abb. 3-10 bis 3-12). Die *a priori*-Verteilung für das SUFIX-Verfahren ist hierbei als gleichförmig vorausgesetzt worden (s. Tabelle 3-6).

Variogramm: Mit den den *soft data* entsprechend zugeordneten Indikatorwerten (1 bis 4) wurde die geostatistische Analyse durchgeführt. Die ermittelten Variogrammparameter enthalten damit nur die Informationen über die Reichweite (Korrelationslänge, *range*) der Indikatorwerte, nicht über die eigentlichen k_f -Werte.

SUFIX 2: Die auf dem einen im vorhergehenden Schritt erstellten Variogramm basierenden *Truncated-Gauss* Simulationen besitzen alle den gleichen *range*, *sill* und *nugget* Wert. Die typischen Längen und die Topologie der generierten Strukturen werden damit nicht variiert. Es wurden vier Indikatorwertebereiche für die Durchlässigkeit gewählt, als fünfter unsicherer Parameter wurde der Anisotropiewert für die Zwischenschichten angenommen. Die Einteilung der k_f -Wertebereiche erfolgte in vier und die Verteilung der Anisotropiefaktoren in 10 Klassen. Die vorausgesetzte *a priori*-Verteilung war in allen Wertebereichen eine gleichförmige Verteilung.

Aus den möglichen 640 Kombinationen wurden für jede Schicht 20 Stichproben gezogen und damit jeweils eine Simulation erstellt. Ein typisches Beispiel hierfür zeigt Abbildung 3-23.

SUFIX 3: Der Propagationspfad der Parameterkombinationen ist in

Abbildung 3-22 dargestellt. Als zusätzliche unsichere Komponente wurde die Anisotropie der k_f -Werte in Form eines Faktors der das Verhältnis zwischen horizontaler und vertikaler Durchlässigkeit beschreibt, mit einbezogen. Es wurden insgesamt 100 Modellrechnungen durchgeführt, da jede Simulation mit 5 verschiedenen Parameterkombinationen belegt wurde.

SUFIX 4: Nach Durchführung der Modellrechnungen erlaubt nach der Auswertung der Ergebnisse auf Erreichen eines vorgegebenen Gütwertes, der in der Zielfunktion definiert ist, schließlich Rückschlüsse auf die wahrscheinlichsten Werte aus Schritt SUFIX 2 und SUFIX 1B, entsprechend der in Abschnitt 2.7.1 auf Seite 50 erläuterten Auswertung nach der Häufigkeit der Unterschreitung einer vorgegebenen Zielfunktion.

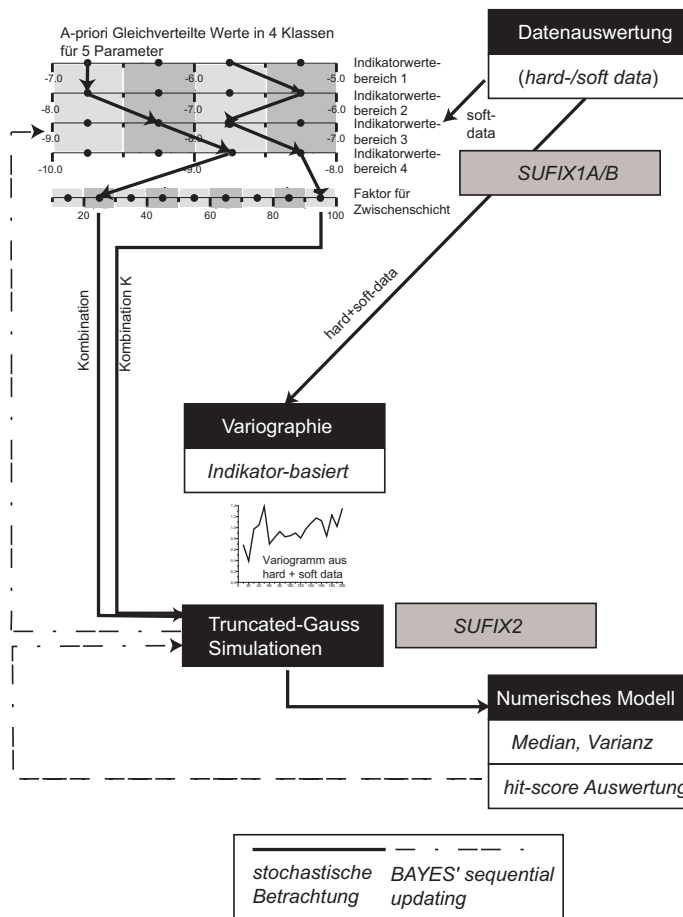


Abbildung 3-21: Gesamtablauf des SUFIX Verfahrens im Propagationspfad TG

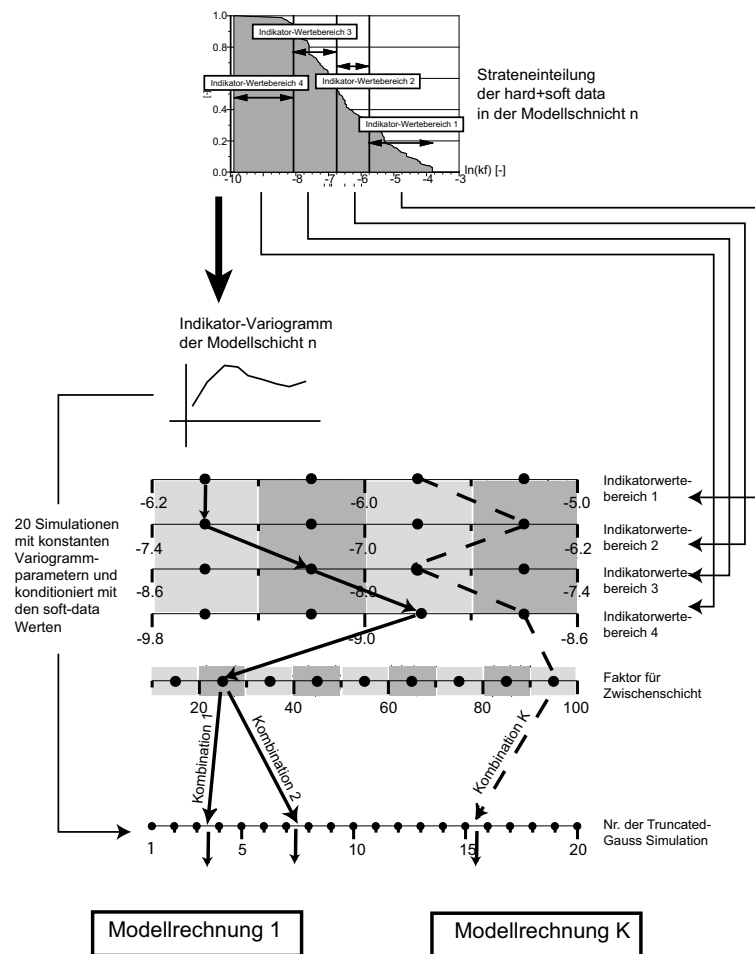


Abbildung 3-22: Mögliche Parameterkombinationen (SUFIX 3) im Propagationpfad TG

Tabelle 3-6: Einteilung der k_F -Werte in 4 Klassen zur Anwendung des SUFIX-Verfahrens

Klasse	Anzahl der Unterteilungen	(ln) der k_F -Werte (gleichförmige Ausgangsverteilung, a-priori Wahrscheinlichkeit)	ln der k_F -Werte nach erstem SUFIX-Iterationsschritt
1	2	-4.0 bis -6.0	-5.0 bis -6.0
2	4	-5.0 bis -7.0	-5.0 bis -7.0
3	4	-6.0 bis -8.0	-7.5 bis -8.0
4	4	-7.0 bis -11.0	-9.0 bis -11.0

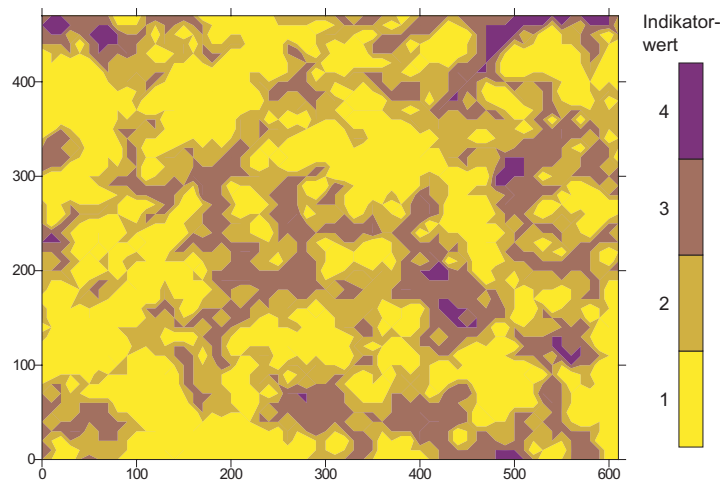


Abbildung 3-23: Beispiel für Truncated-Gauss Simulation für $\ln(k_f)$, zu Schritt SUFIX 2.

3.4.5 Propagationsspfad SA

Auch dieser Pfad basiert auf diskreten Heterogenitätsabbildungen, die anschließend mit Hilfe des Simulated Annealing Verfahrens und der Verwendung einer sog. Trainingsabbildung modifiziert wurden. Die 60 Ausgangsabbildungen wurden nach dem Verfahren der Sequential Indicator Simulation (SIS) mit der Software SISIMPDF (DEUTSCH & JOURNAL, 1992) für jede Modellschicht getrennt erstellt.

Für die SIS Simulationen wurde eine Einteilung der Indikator Klassen wie im Pfad TG gewählt. Für alle Simulationen wurde konstant der Mittelwert jedes Intervalls verwendet. Die generierte Verteilung der Strukturen umfasste damit vier Klassen und in jeder Simulation wurden die Klassen mit den gleichen vier Werten belegt. Die Unsicherheitsbetrachtung konzentriert sich damit auf den Einfluss der Strukturen und weniger auf die Unsicherheit in den ermittelten k_f -Werten.

Die Umsetzung des SUFIX Verfahrens sieht zusammengefasst wie folgt aus:

SUFIX 1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte

SUFIX 1B: Die *soft data*- k_f -Werte wurden in jeder Modellschicht in jeweils vier Intervallklassen³⁶ eingeteilt, wie in den Abbildungen 3-10 bis 3-12 gezeigt. Für alle Rechnungen wurden jeweils die Mittelwerte der Intervallbereiche eingesetzt.

SUFIX 3: Der Propagationsspfad der Parameterkombinationen ist in Abbildung 3-24 dargestellt. Das *Trainings-Image* wurde auf der Grundlage der *soft*

36. Verwendung des Begriffs 'Klasse' erfolgt entsprechend der Definition in LANGGUTH & VOIGT (1980), als *Intervall eines Wertebereiches, der durch eine untere und eine obere Klassengrenze von den Nachbarklassen getrennt ist*.

data interpoliert. Wenn relevante deterministische Strukturen bekannt wären, so könnte das *Trainings-Image* entsprechend manuell modifiziert werden.

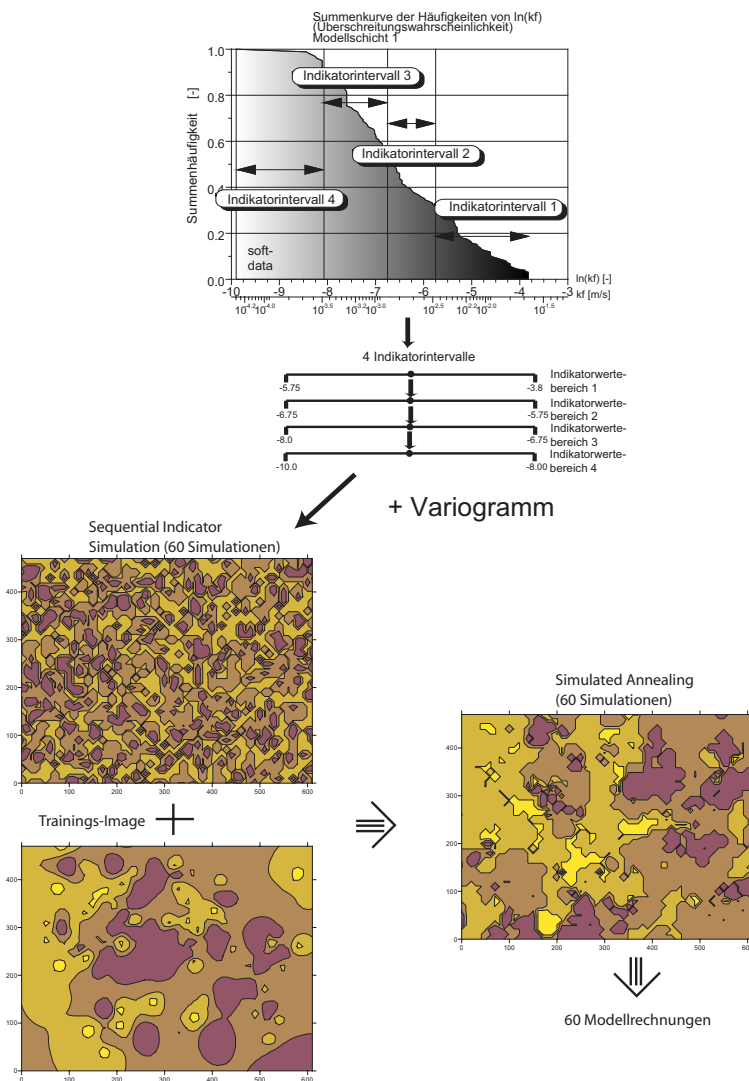


Abbildung 3-24: Schema der Parameterkombinationen im Fall SA (Schritt SUFIX3)

SUFIX 4: Die Auswertung der Modellergebnisse erlaubt in diesem Fall Rückschlüsse auf die geeignetsten Simulationen und weniger auf die den Simulationen zugrundeliegenden Werteverteilungen. Würden alternative *Trainings-Images* eingesetzt, wäre auch ein Rückschluss auf wahrscheinliche übergeordnete deterministische Strukturen möglich.

3.4.6 Propagationspfad MZ

Dieser Propagationspfad ist ähnlich dem Pfad TG strukturiert, statt der Truncated Gauss Simulationen wird hier jedoch eine manuelle Zonierung (MZ) zur Abbildung der Heterogenität verwendet. Neben den harten Daten der k_f -Werte aus der Tracerversuchsauswertung werden wie in den beiden vorhergehenden Pfaden die zusätzlichen Informationen aus der Auswertung der Bohrbeschreibungen berücksichtigt. Dadurch wird es auch bei einer manuellen Zonierung möglich, eine Tiefendifferenzierung der Durchlässigkeiten in das Modell einzubringen, was mit der ausschließlichen Verwendung der harten Daten nicht möglich ist, da diese nur in zwei Tiefenstufen ermittelt wurden. Die entsprechenden k_f -Verteilungen für die obersten drei von insgesamt vier Schichten zeigen die Abbildungen B-4 bis B-6 im Anhang.

Der Ablauf des Verfahrens sieht für diesen Fall wie folgt aus:

SUFIX 1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte.

SUFIX 1B: Die *soft data*- k_f -Werte werden in jeder Modellschicht in jeweils vier Intervallklassen eingeteilt, wie im Propagationspfad TG.

Variogramm: Ist hier nicht notwendig, da keine stochastischen Simulationen verwendet werden.

SUFIX 2: Manuelle Zonierung, wie oben beschrieben.

SUFIX 3: Der Propagationspfad der Parameterkombinationen ist in Abbildung 3-25 dargestellt.

SUFIX 4: Nach Durchführung der Modellechnungen erlaubt eine Auswertung der Ergebnisse auf Erreichen eines vorgegebenen Gütewertes, der in der Zielfunktion definiert ist, schließlich Rückschlüsse auf die wahrscheinlichsten Werte aus Schritt SUFIX 1B.

3.4.7 Vergleichsrechnungen - Fälle TAE1, TAE2, TAE4, COK

Um einen Vergleich der Ergebnisse auf Grundlage des SUFIX Verfahrens mit den Ergebnissen herkömmlicher Methoden zu ermöglichen, wurden Modellrechnungen nach der sog. *trial&error*-Kalibrierungs-Methode vorgenommen. Die Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeiten wurde hierbei als manuelle Zonierung durchgeführt.

Fall TAE1:

Als plausible prägende Struktur für die räumliche Verteilung der Untergrunddurchlässigkeiten wurde eine parallel zum Fluss ausgerichtete Orientierung der Zonierung angesehen. Es handelt sich um einen fluvialen, durch Sedimentablagerungen geprägten Aquifer, so dass diese Annahme plausibel erscheint. Das hydrogeologische Modell wurde hier möglichst einfach gehalten und umfasst nur eine Schicht im Gegensatz zu den vier Schichten des Modells, das außerhalb der Fälle TAE1 und

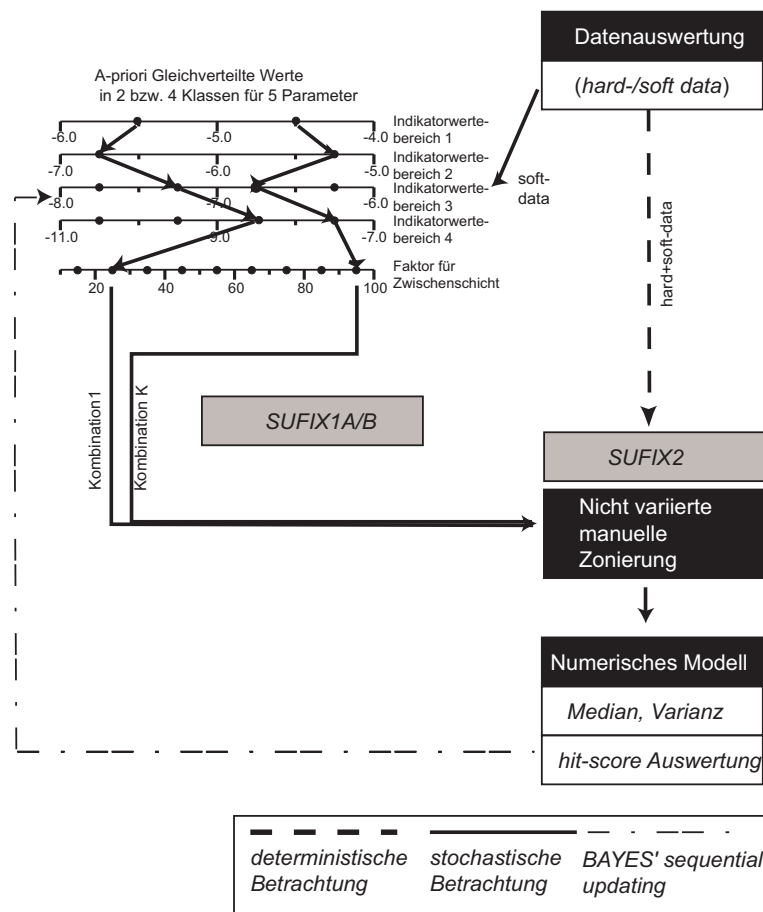


Abbildung 3-25: Schema der Parameterkombinationen im Propagationspfad MZ (Schritt Suffix3)

TAE2 eingesetzt wurde. Für die Zonierung wurden nur die 12 k_f -Werte (*hard data*), die aus der Auswertung des Tracerversuchs nach Gefälle, Fließzeiten und Konzentrationen stammen, verwendet (s. Abschnitt 3.1.3). Abbildung B-7 zeigt die daraus resultierende Verteilung der k_f -Werte.

Fall TAE2:

Eingebrachter Sachverstand ist immer subjektiv, also im Allgemeinen als nicht von anderen Fachleuten reproduzierbar und damit auch als Unsicherheits-Quelle anzusehen. Im Fall TAE2 soll die Auswirkung einer offensichtlich unwahrscheinlichen Zonierung dargestellt werden. Auch diese Zonierung genügt den gleichen harten Daten wie im Fall TAE1 (s. Abbildung B-8).

Fall TAE4:

Im Fall TAE4 wird die gleiche Heterogenitätsabbildung in allen vier Schichten wie im Propagationspfad MZ verwendet. Zur Berechnung werden die Mittelwerte

der Indikatorklassen aus diesem Fall eingesetzt. Es wird also nur eine einzige Berechnung ohne Integration einer stochastischen Komponente durchgeführt.

Fall COK:

Eine Objektivierung der Zonierung kann auch anhand von bivariaten geostatistischen Verfahren erfolgen, die in der Lage sind, als Primär-Variable eine sichere, aber räumlich nur vereinzelt gemessene Größe zusammen mit einer Sekundär-Variable zu verarbeiten, die dichter gemessen wurde, von der aber nur eine geringere Zuverlässigkeit anzunehmen ist. Als stellvertretend für andere Verfahren wurde hier die Cokriging-Methode eingesetzt. Verwendet wurde die Software COKB3D (DEUTSCH & JOURNAL, 1998). Die sich daraus ergebenden k_f -Verteilungen zeigen die Abbildungen B-9 bis B-11.

Die Strukturen in der Heterogenitätsabbildung sind relativ kleinräumig. Trotzdem sind aber bis zu einem gewissen Ausmaß durchgehende übergeordnete Strukturen zu erkennen, wie z.B. in Schicht 1 die von Nord nach Süd verlaufende Zone mit geringen k_f -Werten. Allgemein nimmt von Schicht 1 nach Schicht 3 die Größe der Strukturen ab. Die Schätzvarianz, die Kriging-Verfahren als Ergebnis der Interpolation liefert, wird hier nicht in der Unsicherheitsbetrachtung verwendet. Dies wäre nur zulässig für lineare Modellansätze. Grundwassermodelle verwenden in der Regel jedoch nichtlineare Ansätze. Cokriging dient hier nur dem Zweck der Heterogenitätsabbildung.

3.5 Ergebnisse und Bewertung

Die Ergebnisauswertung für die Fälle, in denen das SUFIX-Verfahren eingesetzt wurde, erfolgt entsprechend dem Schritt SUFIX 4 anhand eines Vergleichs der Rechenergebnisse des Grundwassermodells (getrennt für Strömung und Transport) mit einer geeigneten Zielfunktion. Es wird das Verfahren des *hit-scoring* eingesetzt, wie es auch von ABBASPOUR (1997) beschrieben wurde. Im Sinne des *Bayes*-Theorems kann auf eine derartige Auswertung dann das *sequential updating* erfolgen (s. a. Abschnitt 2.7.1 auf Seite 50).

Die Messung der Wasserstände als Vergleichsdaten konnte aufgrund der Datelage nur in zwei Tiefen erfolgen. Demzufolge wurde die obere Messung der Modellschicht 1 zugeordnet, während für die tiefere Messung die Modellschicht 2 als maßgebend angesehen wurde. Die Beurteilung über die Güte der Ergebnisse hängt auch von der Zielfunktion ab, so dass möglichst mehrere Zielfunktionen für die Bewertung herangezogen wurden (s. a. Abschnitt 2.7.2 auf Seite 55).

3.5.1 Stochastische Simulationen - kontinuierliche Heterogenität

Propagationspfad TB - Strömungsberechnungen:

Die Häufigkeitsverteilung des mittleren Fehlers (hier RMSE) als Gütewert für die Modellrechnungen zeigen die Abbildung 3-26 für die 20 unkonditionierten Simulationen und Abbildung 3-27 für die 100 konditionierten Fälle. Als Zielfunktion hat diese Auswertung den Typ **-ID** entsprechend dem Schema in Tabelle 2-11 (stationäre Rechnung, über alle Messstellen wird gemittelt, die Simulationen werden differenziert betrachtet), als Gütewert wäre auch hier das untere Quartil dieser Häufigkeiten zu verwenden. Der Vergleich der beiden Abbildungen zeigt den Einfluss der Konditionierung auf die Modellergebnisse. Für die Modellschicht 1 ergibt sich eine Reduktion des RMSE-Mittelwertes von 34.0 cm auf 29.1 cm, für die Modellschicht 2 beträgt die Reduktion nur 5 cm (von 50.0 auf 45.0 cm). Die *low-Quartil*-Werte als Gütekriterium für das Erreichen der Zielfunktion sind für die Modellschicht 1 31.8 cm und 27.3 cm und für die Modellschicht 2 47.7 und 43.3 cm (jeweils TB und TBC).

Anhand der Auswertungen der Strömungsrechnungen mittels einer alternativen Zielfunktion des Typs **-DI** (Tabellen A-1 und A-2, stationäre Rechnung, differenzierte Betrachtung der Messstellen, Mittelung über alle Simulationen) ergeben sich für das konditionierte *Turning-Bands*-Verfahren (Fall TBC) über alle Messstellen gemittelt Abweichungen zwischen gemessenen und gerechneten Grundwasserständen (**-II**) von 0.24 m für die flachen und 0.39 m für die tiefen Messstellen.

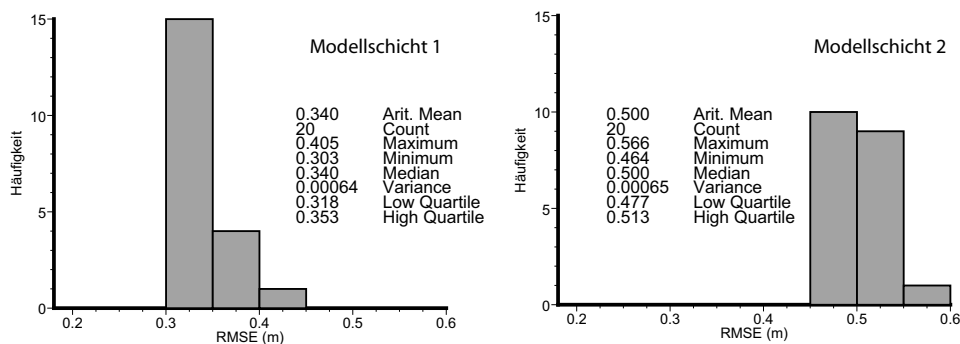


Abbildung 3-26: Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID

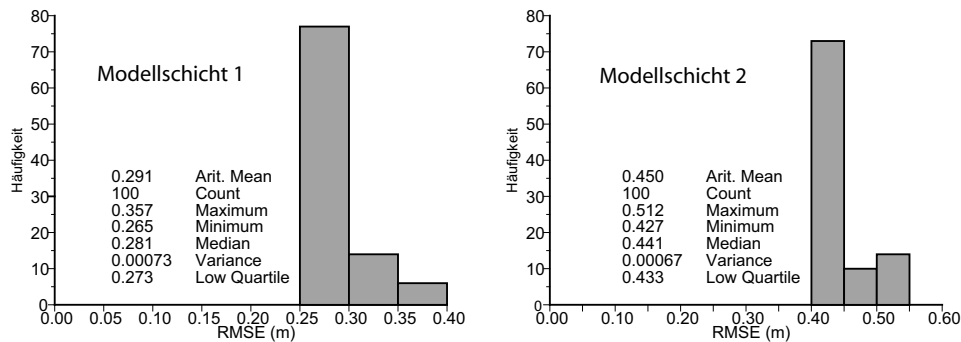


Abbildung 3-27: Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TBC (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID

Propagationspfad TB - Transportberechnungen:

Die Ergebnisauswertung mittels einer vorgegebenen Zielfunktion kann als erster Iterationsschritt des *Bayes'-sequential-updating*-Prozesses aufgefasst werden. Gegenüber dem vorstehenden Vergleich mit den Ergebnissen einer stationären Berechnung (Strömung) ist die Handhabung und Wahl einer geeigneten Zielfunktion für den instationären Fall, wie ihn ein Stoffausbreitungsvorgang darstellt, wesentlich komplexer. Vergleicht man die gemessene Ganglinie an einer Messstelle mit einer gerechneten an jedem Zeitschritt, so ergibt sich eine Zielfunktion vom Typ **DDD**. Hier besteht jedoch das Problem, dass der Gütewert, der entscheidet, ob diese Simulation für zukünftige Prognosen eingesetzt werden soll, sich mit jedem Zeitschritt ändern muss. Eine typische Durchbruchskurve zeigt zum Ende hin deutlich kleinere Konzentrationen als im Mittel, wobei auch die Differenzen in Absolutwerten diesem Trend folgen. Ein fester RMSE-Wert für alle Zeitschritte würde demnach im Maximum der Kurve zu viele Simulationen verwerfen und im Gegenzug am Ende der Kurve zu viele akzeptieren.

Das hier eingesetzte Konzept ermittelt den Gütewert so, dass für jeden Rechenschritt dieser Wert (*low-quartil*) neu berechnet wird. Damit ist **global** die beste Simulation ermittelbar, indem entweder eine RMSE über alle Differenzen zwischen Mess- und Modellwerten einer Simulation gebildet oder die Häufigkeit des Unterschreitens des Gütewertes als Kriterium verwendet wird (jeweils ZF-Typ **DID**). Wegen der oben geschilderten Problematik eines festen RMSE-Wertes wird hier der zweite Ansatz gewählt.

Die Frage ist weiterhin, bis zu welcher Stelle des Propagationspfades das *updating* zurück reichen soll. Maßgebend für das *updating* der *a priori*-Verteilungen der Eingangsdaten ist der in Abbildung 3-19 dargestellte Propagationspfad. Als erstes stehen demnach die Simulationen zur Güte-Beurteilung und anschließend *updating* an.

In der Auswertung zeigt sich, dass je nach Zielfunktion verschiedene Simulationen und damit differierende Eingangs-Parametersätze als 'beste' ausgewiesen werden:

- Wird für die Beurteilung der Strömungsergebnisse ein Zielfunktionstyp **-ID** (stationär, räumlich integriert, differenzierte Simulationen) herangezogen, ergeben sich die Nummern 11 und 20 für die am besten geeigneten Simulationen im unkonditionierten Fall und die Simulationen 2 und 7 als beste im konditionierten Fall (s. a. Tabelle 3-7).

Für die 100 Modellrechnungen wurde jede Simulation mit 5 Stichproben der k_F -Werte konditioniert, wobei sich zeigte, dass für die Strömungsfälle die Stichprobe selbst einen geringeren Einfluss auf die Ergebnisse hat als die Simulation selbst. Dies kann man so interpretieren, dass die Struktur bzw. Topologie des Parameterfeldes einen deutlich höheren Einfluss auf die Ergebnisse besitzt als die Zuweisung der Werte zu den entsprechenden Strukturen. In der Tabelle werden deshalb die Simulationen 2 und 7 mit verschiedenen Stichproben der k_F -Werte jeweils zweimal als optimale Simulation aufgeführt.

- Für die Beurteilung der Transportberechnungen wird die Zielfunktion **IID** (über die Zeit integriert, räumlich integriert, differenzierte Simulationen) verwendet. Hier ist der Einfluss der Struktur nicht so deutlich ausgeprägt, so dass für den optimierten Fall verschiedene Simulationsnummern gefunden werden. Aber auch hier liegen z.B. vier von fünf Modellrechnungen auf Basis der Simulation 18 weit über dem Durchschnitt der Häufigkeiten des Unterschreitens des Gütwertes (s. Abbildung 3-31).

Es ist erkennbar, dass im unkonditionierten Fall (TB) andere Simulationen als 'gut' identifiziert werden als im mit *soft data* konditionierten Fall (TBC). Die Konditionierung der im Fall TB eigentlich 'guten' Simulationen (Nr. 10 und 16) verändert deren Strukturen also derart, dass das Transportverhalten nicht mehr richtig abgebildet werden kann. Die Frage, ob die konditionierten Simulationen die gemessenen Werte besser abbilden als im anderen Fall, ist nicht zu beantworten. Der Grund hierfür ist, dass sich die mittleren RMSE-Werte nicht vergleichen lassen, da verschiedene Zeitschritte in der Häufigkeitsverteilung enthalten sind. Die RMSE-Werte als Gütekriterium sind aber in jedem Zeitschritt verschieden, da sie den absoluten Konzentrationswerten in jedem Zeitschritt angepasst werden (s. Abbildungen 3-28 und 3-29)

Lokal betrachtet führen die zwei global besten Simulationen zu unterschiedlich guten Übereinstimmungen mit den Durchbruchkurven an einzelnen Messstellen. Abbildung B-12 zeigt, dass die gerechneten Durchbruchkurven auf der Basis unterschiedlicher Simulationen durchaus zueinander sehr ähnlich (TS2.2 und Br.02), aber auch deutlich unterschiedlich sein können (V19). Im Falle der Simulation 16 wäre eine lokale *Optimierung* im Bereich der Messstelle V19 notwendig. Die Gesamt-

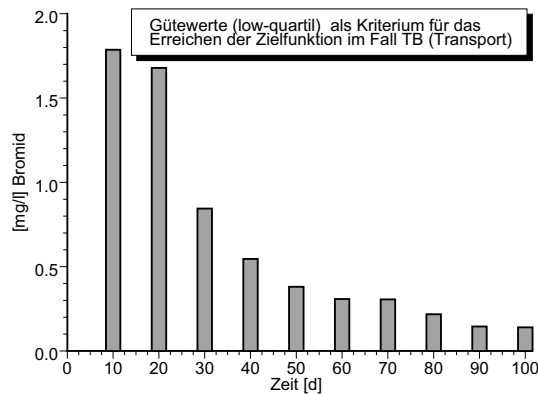


Abbildung 3-28: Wert des Gütekriteriums low-quartil für jeden Zeitschritt im Fall TB

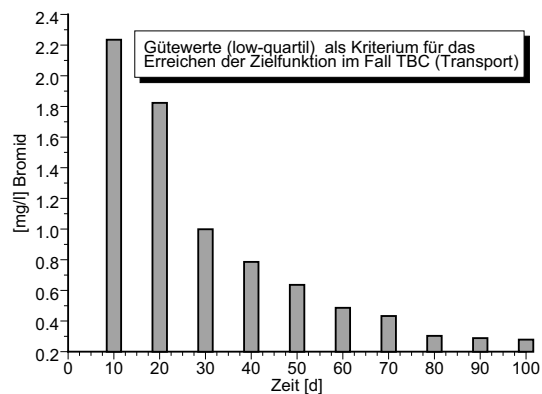


Abbildung 3-29: Wert des Gütekriteriums low-quartil für jeden Zeitschritt im Fall TBC

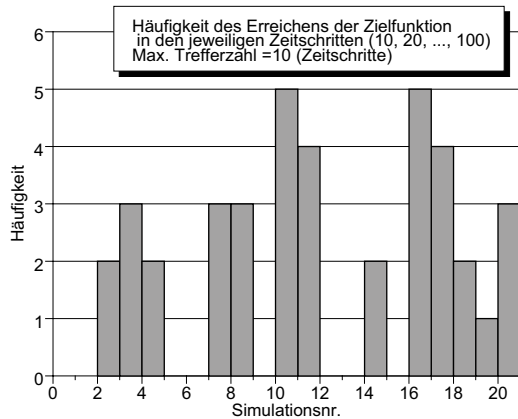


Abbildung 3-30: Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion, Fall TB (Gütwert ist low-quartil).

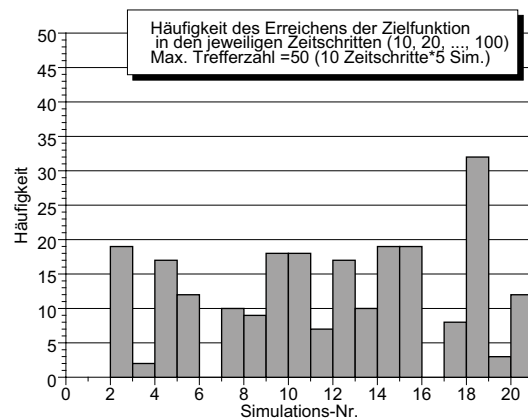


Abbildung 3-31: Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion, Fall TBC (Gütwert ist low-quartil).

streueung der Ergebnisse auf der Grundlage sämtlicher Ergebnisse zeigt Abbildung B-13.

Für den Fall TBC zeigt Abbildung B-14 an drei Messstellen den Vergleich zwischen den Ergebnissen berechnet mit den zwei global besten Simulationen und den jeweils lokal besten Simulationen. Einen Eindruck von der Streubreite der gesamten Ergebnisse gibt Abbildung B-15 in Form eines *mean-box* Diagramms. Gegenüber den Ergebnissen im un konditionalen Fall TB ist die Varianz erwartungsgemäß deutlich verringert

Ein lokales *updating* der TB-Simulationen selbst, z.B. anhand einer Zielfunktion vom Typ **DDD**, ist derzeit erst in Ansätzen möglich (GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 1997) und wurde hier nicht durchgeführt. Dieser Prozess würde auch unterschiedliche

Ergebnisse liefern, abhängig von der Art der Konditionierung. Die Auswahl der Simulationen für tatsächliche Prognoserechnungen ist damit weitgehend an das angestrebte Untersuchungsziel (Strömungsuntersuchungen bzw. Ausbreitungsberechnungen) gebunden (s. dazu auch ABBASPOUR, 2000).

Tabelle 3-7: Beste Simulationen der Strömungs- und Transportberechnungen im Propagationspfad TB.

Fall	ZF-Typ	Nr. der beiden besten Simulationen	Zugehörige RMSE
TB-Strömung Modellschicht 1	-ID	11,20	0.30, 0.31 (m)
TB-Strömung Modellschicht 2	-ID	11,20	0.46, 0.47 (m)
TBC-Strömung Modellschicht 1	-ID	2, 2 (jeweils versch. Konditionierung)	0.26, 0.26 (m)
TBC-Strömung Modellschicht 2	-ID	7, 7 (jeweils versch. Konditionierung)	0.43, 0.43 (m)
TB-Transport	IID	10,16 (Abbildung 3-30)	abhängig vom Zeitschritt (Abbildung 3-28)
TBC-Transport	IID	18,2,14,15 (Abbildung 3-31)	abhängig vom Zeitschritt (Abbildung 3-29)

Auf der Basis der als gut beurteilten *Turning-Bands*-Simulationen kann dann der Propagationspfad weiter zurückverfolgt werden zur nächsten Stufe, den Variogrammen. Die Verringerung der Unsicherheiten des *range*-Parameters der Variogramme zeigt exemplarisch Abbildung 3-32 ebenfalls für den Fall TB. Als Gütewert wurde hier ein mindestens dreimaliges Unterschreiten der *low quartil*-Zielfunktion eingesetzt.

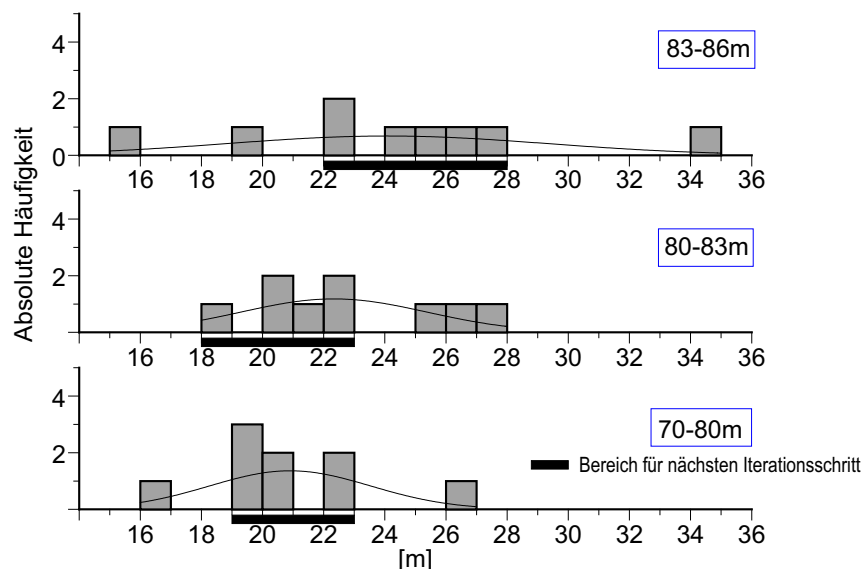


Abbildung 3-32: a posteriori-Verteilung von range (vgl. mit Abbildung 3-17)

Die prinzipielle Möglichkeit des Rückschlusses z.B. auf den k_f -Wert für die jeweilige Bohrung und Tiefe ist in der Abbildung 3-33 gezeigt. Links ist jeweils die Ausgangsverteilung (*a priori*-Wahrscheinlichkeiten) und rechts die *a posteriori*-Verteilung dargestellt. Grundlage für dieses *updating* ist das Ergebnis der Strömungsberechnung im Fall TB.

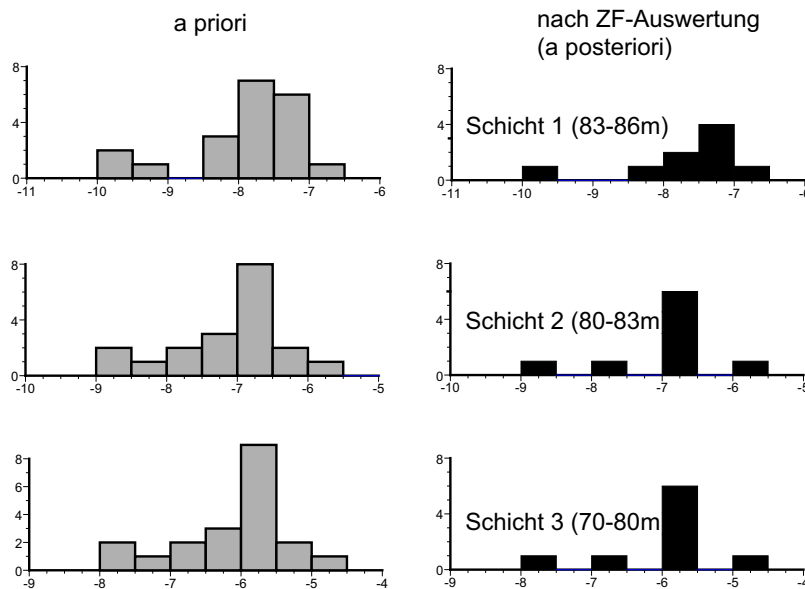


Abbildung 3-33: Updating der k_f -Verteilung am Bohrpunkt 11

Es muss also festgehalten werden, dass für eine Auswertung nach den Gütekriterien des Falles TBC abweichende Ergebnisse für die maßgebenden Verteilungen der Durchlässigkeit und der Variogrammparameter zu erwarten sind. Die für eine Stoffausbreitung im Boden verantwortlichen Strukturen können demnach nicht zweifelsfrei und eindeutig aus den Ergebnissen von Strömungsberechnungen abgeleitet werden. Nicht untersucht wurde hier die Zuverlässigkeit der Messungen der Parameter, die für die Gütebeurteilung der Transportberechnungen eingesetzt wurden. Systematische Fehler bei der Analyse der Wasserinhaltsstoffe können die Ergebnisse einer Unsicherheitsanalyse sicher maßgeblich beeinflussen. Sind Fehlergrenzen der Analysen bekannt, können auch die Messwerte im SUFIX Verfahren als unsichere Größen berücksichtigt werden. Hierzu müsste dann eine *a priori* Verteilung der Messwerte angenommen werden und für die Gütebeurteilung der Modellergebnisse müssten dann jeweils Stichproben aus diesen Verteilungen gezogen werden.

Ein Ganglinienvergleich zwischen gemessenen und berechneten Konzentrationen (ZF-Typ **DDD**) bietet einen qualitativen Eindruck von der Güte der Simulationen. Hier tritt besonders deutlich das Problem des Unterschieds zwischen lokaler und globaler Güte einer Simulation hervor. Dies bedeutet, dass die global besten

Simulationen lokal nicht unbedingt die beste Übereinstimmung an allen Messstellen repräsentieren.

Die globale Güte dieses Propagationspfades ist mittels eines über alle Transportberechnungen gemittelten RMSE Werts (Zielfunktions-Typ **III**) möglich. Für den Fall TBC beträgt dieser 1.31 mg/l bzw. 1.12 mg/l als Mittel über die 25% besten Simulationen (s. Tabelle A-3). Für *updating*-Zwecke ist diese Zielfunktion wegen ihres globalen Charakters nicht verwendbar

Einen qualitativen Eindruck über die Güte der Simulationen in Bezug zu räumlichen Lage der Messstellen gibt eine Darstellung des Zielfunktionsstyps **IDI**, wo die RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert wird (s. Abbildung B-20). Hier wurde eine Interpolation der *low quartil*-Werte aus Tabelle A-3 vorgenommen. Vergleicht man die Auswertungen verschiedener Propagationspfade miteinander, lassen sich eventuelle systematische Abweichungen lokalisieren, die sich aus Annahmen über das zugrundeliegende konzeptionelle (hydrogeologische) Modell ergeben. Hierzu gehören z.B. Annahmen über Brunnenförderungen, welche die Modellergebnisse derart (über)prägen können, dass der Einfluss der Variation anderer Parameter durch unterschiedliche Simulationen in den Hintergrund tritt.

3.5.2 Stochastische Simulationen - diskrete Heterogenität

Propagationspfad TG - Strömungsberechnungen:

Die Güte der gesamten Strömungsberechnungen mit dem *Truncated Gauss*-Verfahren zur Simulation der Durchlässigkeitsfelder zeigt die Abbildung 3-34 als Häufigkeitsverteilung der RMSE. Die mittleren Abweichungen betragen an den Flachmessstellen 0.38 m und an den Tiefmessstellen 0.54 m.

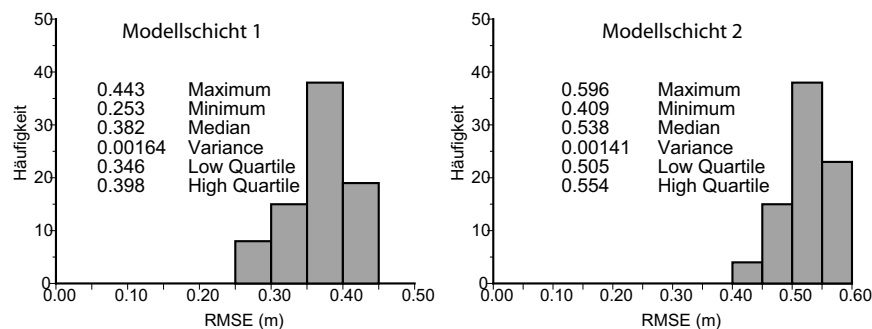


Abbildung 3-34: Absolute Häufigkeiten der RMSE Fall TG (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), ZF-Typ: -ID}

Führt man die Güteauswertung alternativ nach einer Zielfunktion vom Typ **-DI** durch, ergibt sich ein mittlerer Fehler von 0.36 m an den Flachmessstellen bzw. von 0.51 m an den Tiefmessstellen (s. Tabellen A-4 und A-5). Eine hydraulische Trennfunktion, wie sie durch die Potenzialdifferenzen zwischen Flach- und Tiefmessstellen nachgewiesen ist, wird demnach nicht nachgebildet.

Propagationspfad TG - Transportberechnungen:

Der mittlere RMSE Wert (Zielfunktionstyp **III**) liegt mit 1.11 mg/l an zweiter Stelle aller untersuchten Fälle (s. Tabelle 5-1 und Tabelle A-6).

Eine globale Auswertung der Transportberechnungen wird wie im vorhergehenden Fall abhängig vom Zeitschritt durchgeführt (ZF-Typ **DID**, d.h. nur der Ort wird integriert betrachtet). Der Gütewert kann hier jedoch, wegen der relativ großen Anzahl von Simulationen strenger gefasst werden. Es wird die Hälfte des *low quartil*-Wertes verwendet, so dass bei 80 Simulationen insgesamt die jeweils 10 besten als 'gut' eingestuft werden (s. Abbildung 3-35).

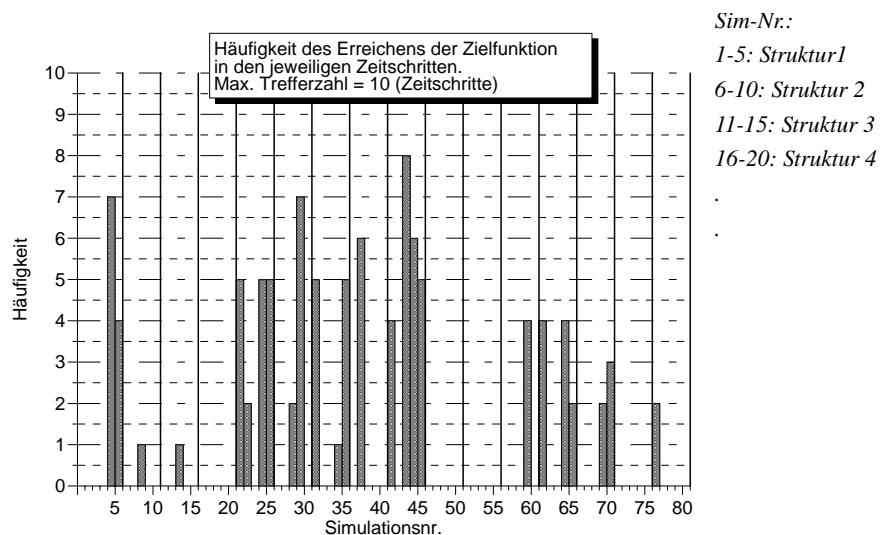


Abbildung 3-35: Häufigkeit des Unterschreitens der Zielfunktion im Fall TG (Gütwert ist $\text{low quartil} \cdot 0.5$)

Tabelle 3-8: Globale Güte der besten Simulationen

Fall	ZF-Typ	Nr. der 3 besten Simulationen	zugehörige RMSE
TG-Strömung (Modellschicht 1)	-ID	43,24,4	0.26; 0.29; 0.29 [m]
TG-Strömung (Modellschicht 2)	-ID	43,24,4	0.43; 0.46; 0.46 [m]
TG-Transport	IID	43,4,29	0.26; 0.29; 0.29 [mg/l]

Im Gegensatz zum Fall TB entsprechen hier die besten Simulationen zur Nachbildung der Strömungsverhältnisse (Nr. 43,24,4) weitgehend denen, die auch bei den Transportrechnungen als geeignet eingestuft werden (Nr. 43,4,29).

Ganglinienvergleiche der Durchbruchkurven an ausgewählten Punkten erlauben eine Abschätzung, inwieweit die global besten Simulationen auch die lokalen Messungen wiedergeben können. Wie im vorhergehenden Fall wird anhand dreier ausgesuchter Messstellen eine Gegenüberstellung der global besten und der lokal besten Ergebnisse gegeben (s. Abbildung B-16). Die Streuung der Ergebnisse für jeden Zeitschritt zeigt Abbildung B-17.

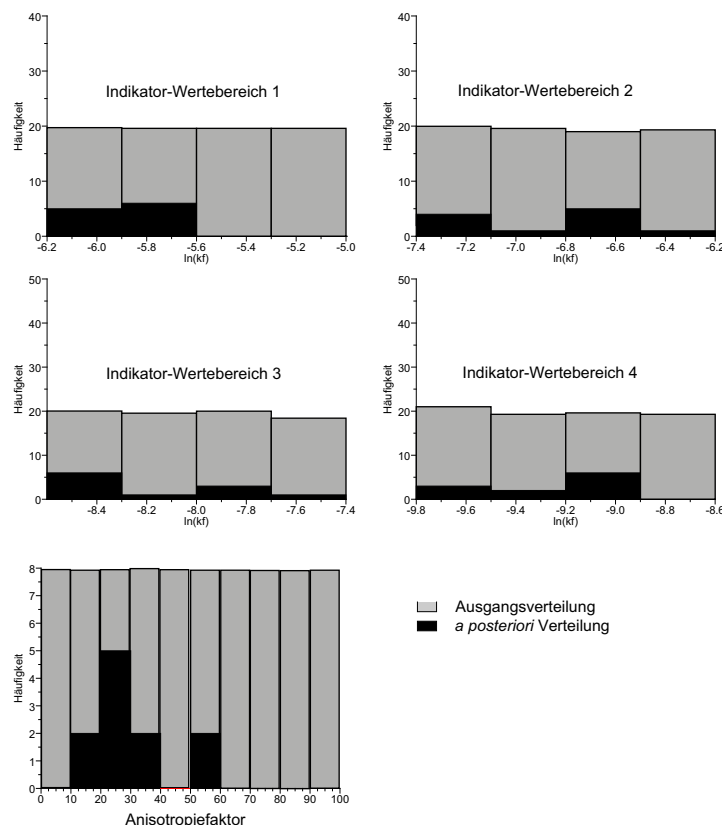


Abbildung 3-36: Vergleich von Ausgangsverteilung und a posteriori-Verteilung der k_f -Intervalle und der Anisotropiefaktoren der Zwischenschicht (Fall TG)

Nach Vergleich mit dem Gütewert einer Zielfunktion (hier RMSE) ist ein *updating* der Eingangsparameter der Modellierung möglich. Die Abbildung 3-36 zeigt die *a posteriori*-Verteilungen für die vier verwendeten Indikatorintervalle der k_f -Werte und die Anisotropiefaktoren der Zwischenschicht. Die Verteilungen nach dem *updating*-Prozess basieren auf den Ergebnissen der Transportberechnungen. Als Gütewert wurde ein mindestens fünfmaliges Erreichen des *low-quartil*-Wertes der jeweiligen Zeitschritte vorgegeben. Es ist zu erkennen, dass die *a posteriori*-Ver-

teilungen für die k_f -Wert-Intervalle keine signifikante Einschränkung des Unsicherheitsbereiches aufweisen. Lediglich für das Intervall 1 und die Anisotropiewerte ist eine merkliche Häufung der Werte in einem begrenztem Klassenbereich zuerkennen. Führt man das *updating* allein auf Grundlage der Strömungsberechnungen durch, ist keinerlei Verbesserung der angenommenen Unsicherheitsbereiche zu erkennen.

Ein *updating* der *a priori*-Werte aus dem Schritt SUFIX 1B ist mit diesem Verfahren in dieser Anwendung damit nur sehr eingeschränkt möglich. Da die Simulationen mit konstanten geostatistischen Parametern erstellt wurden (Schritt SUFIX 2), verschiebt sich die Verringerung der Parameter-Unsicherheit auf das *ranking* der Simulationen. Das bedeutet, dass ein sinnvolles *updating* erst in Schritt SUFIX 4 in der Art durchgeführt werden kann und demzufolge die Prognoserechnungen nur mit den Simulationen durchgeführt werden, die die Zielfunktion unterschreiten. Nachteilig hierbei ist die Tatsache, dass die Zielfunktion nur die global besten k_f -Verteilungen berücksichtigt, während durch eine Einbeziehung der Verbesserung der Intervall-Sicherheiten in Schritt SUFIX 1B auch eine lokale Verbesserung der Durchlässigkeitsverteilungen möglich wäre.

3.5.3 Propagationspfad SA (Simulated Annealing)

Die RMSE als Auswertung zur Güte der Strömungsberechnungen ist in Abbildung 3-37 jeweils als Häufigkeitsdiagramm für den Vergleich mit Flach- und Tiefmessstellen dargestellt. Da die Wertezuweisung zu den Strukturen des Simulated Annealing mit konstanten Mittelwerten in jedem Indikatorintervall erfolgte, ist eine Rückrechnung auf die wahrscheinlichsten Intervallwerte hier nicht möglich bzw. notwendig.

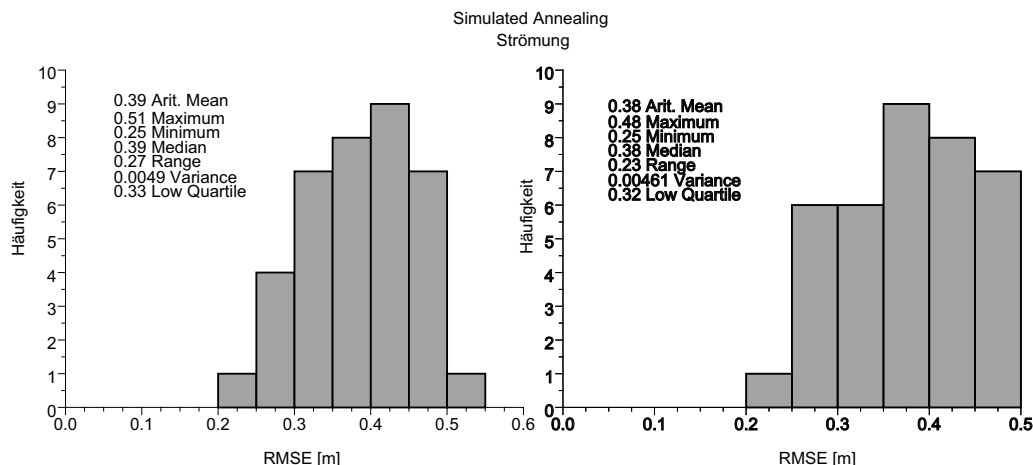


Abbildung 3-37: Absolute Häufigkeiten der RMSE (Strömung) - Flach (links) und Tief (rechts), Fall SA, ZF-Typ: -ID

3.5.4 Propagationsspfad MZ (Manuelle Zonierung)

Strömung:

Die RMSE als Auswertung zur Güte der Strömungsberechnungen ist in Abbildung 3-38 jeweils als Häufigkeitsdiagramm für den Vergleich mit Flach- und Tiefmessstellen dargestellt.

Die Auswertung der Strömungsberechnungen entsprechend dem SUFIX-Verfahren, das über eine 'Treffer-Auszählung' anhand des Erreichens einer vorzugebenen Zielfunktion (hier: RMSE) Rückschlüsse auf die tatsächlichen Eingangswerte zulässt, brachte die in Abbildung 3-39 gezeigten Ergebnisse für die Verteilung der k_f -Werte in den einzelnen Intervallbereichen. Insgesamt wurden 40 Realisationen der k_f -Verteilungen erzeugt und damit 40 Modellrechnungen durchgeführt.

Eine eindeutige Eingrenzung hinsichtlich der tatsächlichen Eingangswerte für jede Klasse ist anhand der Strömungsberechnungen nur für die Wertebereiche 1 und 3 möglich. In einem weiteren Iterationsschritt wären die Wertebereiche 1 und 2 zusammenzulegen und der Bereich 4 noch weiter zu unterteilen. Ebenfalls dargestellt ist die Abhängigkeit der Ergebnisse vom Gütewert der Zielfunktion. Die Unterschiede zwischen einem Wert von 0.15m und 0.11m, die jeweils unterschritten werden müssen, sind deutlich zu erkennen. Eine Verbesserung des *updating* war auch mit einer entsprechenden Auswertung auf Grundlage der Transportberechnungen nicht möglich.

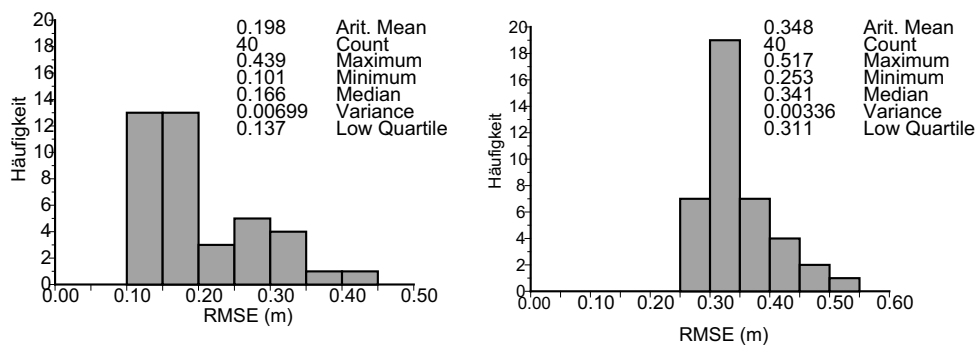


Abbildung 3-38: Absolute Häufigkeiten der RMSE (Strömung) - Flach (oben) und Tief (unten), Fall MZ, ZF-Typ: -ID

Transport:

Die Ermittlung der Güte der einzelnen Simulationen im Bezug zu den Ergebnissen der Transportberechnungen ist in Abbildung 3-40 auf der Grundlage von drei verschiedenen Zielfunktionen durchgeführt worden.

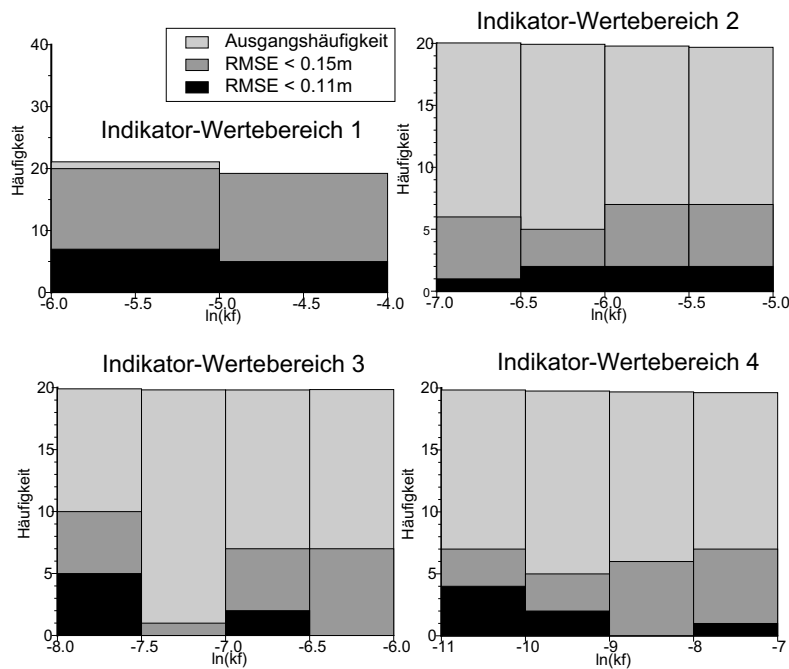


Abbildung 3-39: Vergleich von Ausgangsverteilung und a posteriori-Verteilung der k_f -Intervalle (Fall MZ)

Die erste Auswertung (oberes Diagramm) entspricht der in den vorhergehenden Fällen verwendeten, indem global (über alle Messstellen) das untere Quartil der RMSE-Werte aus den Abweichungen zwischen Messung und Rechnung für jeden Zeitschritt ermittelt wurde. Jede Simulation, deren RMSE-Wert den *Quartil*-Wert unterschreitet, wird in der Auswertung als geeignete Simulation angesehen. Die mittlere Auswertung in der Abbildung 3-40 ermittelt dagegen den unteren Quartil-Wert lokal aus den Abweichungen an jeder Messtelle, es spielt hierbei keine Rolle, in welchem Zeitschritt die besten Simulationen ermittelt wurden. Die untere Auswertung weicht von den beiden vorstehenden insofern ab, als hier nicht nur das untere Quartil, sondern sämtliche Ergebnisse der Rechnungen einbezogen wurden. Konkret wurde jeder Simulation in jedem Zeitschritt eine Platzziffer zugeordnet. Da fünf der 40 Modellrechnungen wegen Konvergenzproblemen nicht zu Ende geführt werden konnten, verblieben als mögliche Platzziffern die Werte 1 bis 35. Die Platzziffern wurden über alle Zeitschritte aufsummiert und durch Subtraktion von der maximalen Ziffer und Division durch die Spannweite zwischen bester und schlechterer Gesamtziffer auf 1 normiert. Als Hauptvorteil dieses letzten Verfahrens ist zu sehen, dass jede Simulation einen eindeutigen Rang erhält, während bei den Häufigkeit-basierenden Verfahren mehrere Simulationen den gleichen Rang belegen können.

Die Differenzen zwischen der zweiten und dritten Auswertungsoption sind nicht signifikant, die als gut eingestuft Simulationen sind in etwa die gleichen. Dagegen zeigen die erste und zweite Auswertung deutliche Differenzen. Sämtliche vier Simu-

lationen, die in der Abbildung nach den beiden letzten Auswertungen als beste eingestuft wurden (Nr. 2,6,10,18), werden in der ersten Auswertung nur mit mittlerer Güte eingestuft.

Insgesamt scheint das *ranking*, wie es auch von COPTY & FINDIKAKIS (2000) vorgeschlagen wird, Vorteile gegenüber dem Ansatz des Vergleichs mit einer Zielfunktion zu besitzen. Die Vorteile beruhen wohl hauptsächlich darauf, dass bei der Auswertung immer alle Simulationen berücksichtigt werden und kein mehr oder weniger willkürlicher Gütewert definiert werden muss, der u.U. für eine Verzerrung in den Ergebnissen verantwortlich sein kann.

Einen Vergleich der Ganglinien an drei Messstellen zeigt Abbildung B-18. Die Streubreite der Modellergebnisse an den gleichen drei Messstellen ist in Abbildung B-19 als *mean box* Auswertung dargestellt. Eine Übersicht der räumlichen Verteilung der jeweiligen *low quartil*-Werte an den 30 Messstellen gibt Abbildung B-22. Die relative Verteilung der Messstellen mit den größten Abweichungen ähnelt der aus den vorher beschriebenen Fällen, die Werte sind aber insgesamt kleiner.

3.5.5 Vergleichsrechnungen

Fall TAE1 - Strömung:

Da hier nur eine einzelne Rechnung durchgeführt wurde, entfallen die Auswertungen zur Variation der Ergebnisse. Abbildung B-23 zeigt das Ergebnis der Strömungsmodellierung als Gleichesplan der Grundwasserpotentiale. Als Maß für die Güte der Modellierung wird der über alle Messstellen gemittelte RMSE der Abweichungen zwischen Messungen und Rechenergebnissen an den verfügbaren 12 Beobachtungspunkten für Grundwasserstände verwendet. Die mittlere Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Grundwasserständen beträgt 0.17 m (s. Tabelle A-10). Die Abweichungen sind nicht gleichmäßig über die Fläche verteilt, im Bereich der Messstellen TS3.1 bis TS3.3 ist eine gegenüber anderen Bereichen deutlich erhöhte Differenz festzustellen (s. Abbildung B-24). Eine weitere Optimierung der k_f -Verteilung würde bei einer manuellen Kalibrierung demnach in diesem Bereich ansetzen. Die Unterschiede in den Abweichungen zwischen Flach- und Tief-Messstellen entsprechen etwa dem gemessenen Potenzialunterschied zwischen beiden Tiefenstufen, was durch die Vernachlässigung einer Schichtung in diesem Modellansatz auch zu erwarten war.

Fall TAE1 - Transport:

Auch für die Beurteilung der Güte der Tracermodellierung wurde der RMSE-Wert verwendet, wobei hier auch über alle 10 Zeitschritte der Rechnung integriert wurde. Im Fall der Tracerausbreitung beträgt der RMSE Wert 1.36 mg/l (s. Tabelle A-11). Es erfolgt ein Vergleich mit den Konzentrationsmessungen an insgesamt 30 Messstellen. Hierzu gehören auch die 12 Messstellen, die in zwei Tiefen ausgebaut wurden. Ein Vergleich der Konzentrationen erfolgt in der Tabelle nur für die Messungen in den T-Messstellen, da auch die 18 anderen Messungen im Untersuchungsgebiet als Tiefmessungen angesehen werden können.

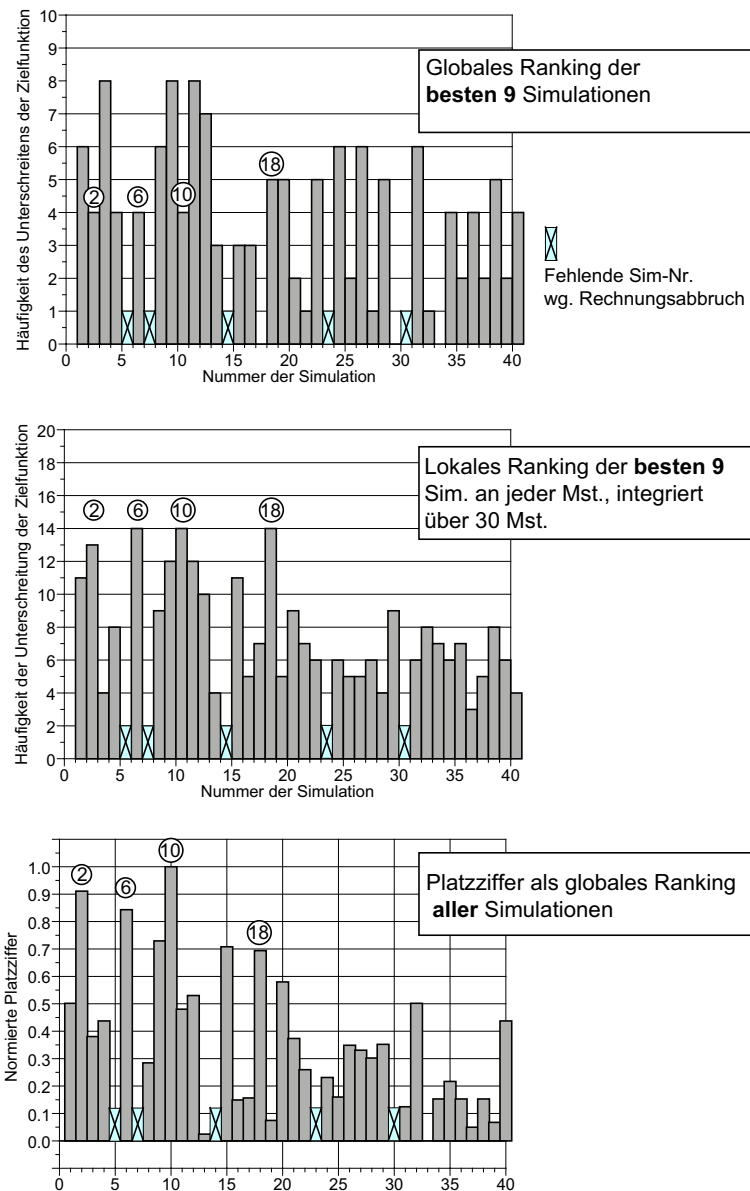


Abbildung 3-40: Vergleich der Güte der Transportmodellierung mit verschiedenen Zielfunktionen (Fall MZ)

Stellt man die Werte aus Tabelle A-11 als flächige Verteilung dar (Abbildung B-24), erkennt man auch hier wie bei den Strömungsergebnissen, dass die Abweichungen nicht gleichmäßig verteilt, sondern vor allem im nördlichen Bereich konzentriert sind.

Fall TAE2 - Strömung:

Der RMSE-Wert für die Strömungsberechnung ist mit 0.21 m höher als im Fall TAE1, jedoch liegt auch hier die größte Abweichung zur Messung im Bereich der

Punkte TS3.1 bis TS3.3 (s. Tabelle A-12). Abbildung B-25 zeigt die Potentialverteilung in diesem Rechenfall.

Fall TAE2 - Transport:

Die Transportrechnung zeigt mit 1.35 mg/l einen fast exakt gleich großen RMSE-Wert wie im Fall TAE1. Als Ursache für die räumlich sehr ähnliche Verteilung der Modellabweichungen (Abbildung B-26) müssen in erster Linie die durch die grobe Zonierung und das einschichtige hydrogeologische Modell nicht erfassten lokalen transportwirksamen Strukturen angesehen werden. Die unterschiedlichen großskaligen Strukturen spielen in diesem Fall anscheinend keine Rolle. Zusätzlich können jedoch auch Messfehler an diesen Punkten von Bedeutung sein.

Fall TAE4:

Für die Grundwasserstände ergeben sich in Schicht 2 folgende Verhältnisse (s. Abbildung B-27). Die Differenz zu den anderen Schichten ist nicht sehr ausgeprägt, die Unterschiede zum Fall TAE1 sind jedoch deutlich erkennbar.

Trotz der Integration zusätzlicher Informationen ergibt sich bei der Berücksichtigung von Zusatzinformationen in Form der Bohrdatenauswertungen eine Verschlechterung des Ergebnisses für die Strömung gegenüber den Fällen TAE1 und TAE2. Je mehr Information für die Zonierung der k_f -Werte verfügbar ist, desto kleiner werden die Zonen selbst. Das heißt, die aus den Bohrdaten gewonnenen Informationen bilden augenfällig nicht die Strukturen ab, die für die Strömung wichtig sind. Andererseits ergibt sich aber eine Verbesserung für die Nachbildung der Transportvorgänge gegenüber den beiden anderen Fällen, woraus zu schließen ist, dass die kleinräumige Zonierung die bevorzugten Fließwege für die Stoffausbreitung besser widerspiegelt als die großen homogenen Durchlässigkeitsbereiche.

Cokriging:

Die berechneten Grundwasserpotentiale ähneln deutlich denen aus Fall TAE4 (Abbildung B-28), was wohl auf die ähnlichen Größen der Zonen gleichen k_f -Wertes zurückzuführen ist. Die räumliche Verteilung der Modellabweichungen zeigt Abbildung B-29.

Neben der Größe der RMSE ist auch die Verteilung und Größe der Modellabweichungen für die Strömungsberechnung mit denen im Fall TAE4 fast identisch. Die mittlere RMSE für die Transportkalibrierung ist jedoch schlechter als in den drei vorhergehenden Fällen.

Es zeigt sich, dass bei den Differenzen für die Flachmessstellen immerhin 22 Ergebnisse unter dem RMSE-Wert des Falls TAE1 (0.17m) liegen. Der mittlere RMSE-Wert (ZF-Typ: -II) liegt mit 0.13 m deutlich unter den Ergebnissen der oben beschriebenen Fälle. Werden für Prognoserechnungen nur die besten 25 % der Realisationen verwendet, vermindert sich der mittlere Fehler für die Strömungsberechnungen auf 0.09 m. Der Vergleich für die Tiefmessstellen bringt analog zu den vorhergehenden Fällen im Mittel ein deutlich schlechteres Ergebnis mit 0.30 m. Auch hier ist also festzustellen, dass die Wirkung der durch Messungen bestätigten Trenn-

schicht nicht ausreichend nachgebildet werden kann. Auch der beste RMSE-Wert für eine einzelne Simulation liegt noch bei 0.253 m.

3.6 Zusammenfassung

In der Fallstudie wird die Anwendung des SUFIX Verfahrens auf eine konkrete Problemstellung gezeigt. Das Untersuchungsgebiet kann man mit einer Fläche von 0,25 km² auf der eine hydraulische Sanierung durchgeführt werden sollte als kleinräumig bezeichnen.

Es konnte eine Vielzahl von Bohrprofilen für die Generierung von Durchlässigkeitsbeiwerten als *soft data* verwendet werden. Für die Aufstellung des hydrogeologischen Modells wurde zusätzlich auf die Ergebnisse eines Tracerversuchs zurückgegriffen. Diese Ergebnisse dienten darüber hinaus als Grundlage für die Beurteilung der Eignung der gewählten Propagationspfade zur Quantifizierung der Modellunsicherheiten und zur Bewertung der Güte der unterschiedlichen Verfahren, mit denen jeweils die Abbildung der Bodenheterogenität durchgeführt wurde.

Für die Erstellung des hydrogeologischen Modells wurden sechs Schichten identifiziert, von denen die untersten vier in das numerische Modell übernommen wurden. Die anderen beiden bilden die ungesättigte Zone, die in dieser Arbeit nicht betrachtet wird. Mit dem numerischen Modell wurde zuerst eine stationäre Berechnung der Grundwasserströmung vorgenommen. Die sich anschließende Berechnung des Ausbreitungsverhaltens des Bromid Tracers wurde über einen Zeitraum von 100 Tagen durchgeführt.

Die Güte der Generierung der *soft data* aus den Bohrbeschreibungen konnte anhand von Korrelationsdiagrammen an einzelnen Punkten überprüft werden. Der Ablauf des SUFIX Verfahrens wurde jeweils an die spezifischen Erfordernisse der einzelnen Propagationspfade mit unterschiedlichen Methoden der Heterogenitätsabbildung angepasst. Die als unsicher anzunehmenden Parameter waren entsprechend weitgestreut und reichten von den k_f -Werten (als *soft data*), über Variogrammparameter bis zur Belegung der Strukturen mit Durchlässigkeitsbeiwerten bei den stochastischen Simulationen mit indikatorbasierten Methoden.

Bei den Ergebnissen zeigte sich deutlich, dass die räumliche Verteilung der generierten Zonen gleicher Durchlässigkeit generell einen größeren Einfluss auf die Ergebnisse hat als die Veränderung der Werte, die ihnen zugewiesen werden. Dies spiegelt sich vor allem darin wider, dass die Ergebnisse auf Grundlage von manuellen Zonierungen keine schlechtere Güte aufweisen als die anderen Verfahren. Als für das *Bayes' updating* am besten geeignet erweisen sich die Propagationspfade, die indikatorbasierte Heterogenitätsabbildungen einsetzen.

4

Fallstudie 2: Neuwieder Becken

Die hier verwendeten Daten stammen aus Untersuchungen, die im Vorfeld und während einer hydraulischen Sanierung im Neuwieder Becken gewonnen wurden. In den Jahren 1984 bis 1987 wurde an 61 Messstellen die Konzentrationen von Trichlorethen und Tetrachlorethen, die vor allem in der Industrie als Entfettungs- und Reinigungsmittel verwendet werden, gemessen. Während in der Fallstudie 1 die Anwendung von Unsicherheitsanalysen auf ein kleinräumiges und in der Untergrundstruktur sehr heterogenes Gebiet dargestellt wurde, stellt das Neuwieder Becken ein Fall dar, in dem diese Verfahren auf ein mittelskaliges und eher homogenes Untersuchungsgebiet angewendet werden.

4.1 Datenauswertung

4.1.1 Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet umfasst das Neuwieder Becken zwischen dem Oberrhein Graben im Südosten und der Niederrheinischen Bucht im Nordwesten (s. Abbildung 4-4). Für hydrologische/-hydrogeologische Untersuchungen ist dieses Gebiet besonders geeignet, da sich der Hauptgrundwasserleiter gut abgrenzen lässt und auch die anderen hydrologischen Randbedingungen gut fassbar sind. Zudem ist der Umfang der vorhandenen Datenbasis generell als groß zu bezeichnen.

4.1.2 Geologische Verhältnisse

Eine vereinfachte Übersicht zu den generellen geologischen Verhältnissen zeigt Abbildung 4-1. Entsprechende geologische Schnitte sind aus Abbildung 4-2 zu entnehmen. Insgesamt liegen für das Neuwieder Becken 460 Bohrprofilbeschreibungen vor, die aus sehr unterschiedlichen Quellen stammen und eine entsprechend breite Streuung ihrer Qualität aufweisen. Die auswertbaren Beschreibungen wurden in eine Datenbank überführt, wobei den jeweiligen Schichtansprachen durch einen Geologen ein oder mehrere Kürzel (nach DIN 18196) zugewiesen wurden, um die späteren Auswertungen nach dem Verfahren in Abschnitt 2.7.3 auf Seite 60 zu ermöglichen. Zur fachlichen Plausibilitätskontrolle wurden alle Datenbankeinträge über ein Auswertprogramm grafisch als Profile dargestellt, wobei die DIN-Kürzel in entsprechende Signaturen konvertiert wurden. Ein Beispiel hierfür wird in Abbildung 4-3 gezeigt. In die endgültige Auswertung wurden 351 Profilbeschreibungen übernommen. In Abbildung 4-4 sind dies alle Bohransatzpunkte, die innerhalb der Rechteckumrandung liegen, welche die Grenze des Auswertungsbereiches markiert.

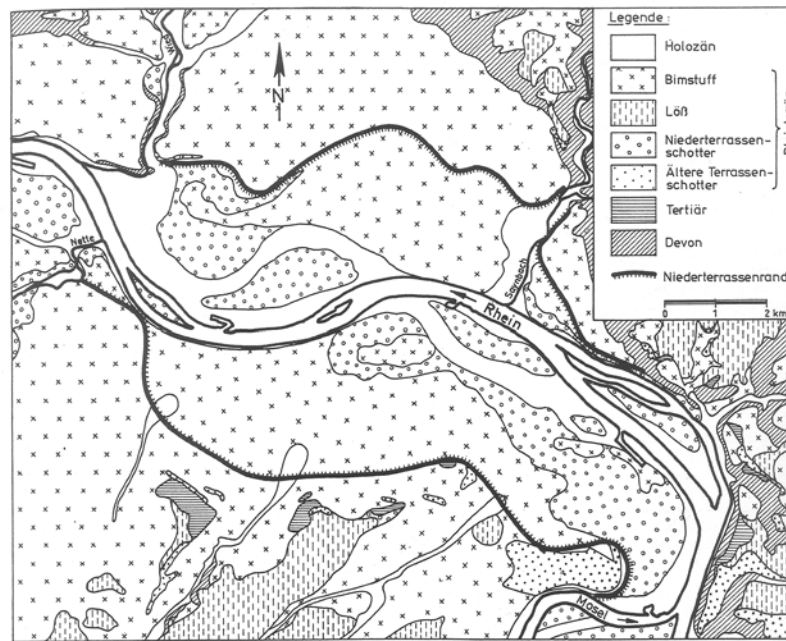


Abbildung 4-1: Vereinfachte geologische Karte des östlichen Teils des Neuwieder Beckens

Neben den Bohrprofilen wurden auch Sieblinien ausgewertet, die aus dem Material der etwa 5-10m in den Aquifer einschneidenden Rheinsohle gewonnen wurden (s. Abbildung 4-5). Sie spiegeln demzufolge vor allem die Verhältnisse im mittleren Tiefenbereich der Beckenfüllung (etwa 10-20m mächtig) wider. Eine Auswertung der Sieblinien wurde nach den Transferfunktionen von HAZEN (1892) und BEYER (1964) durchgeführt.

Die Auswertung nach HAZEN erfolgte mit:

$$k_f = 0.0116 \cdot d_{10}^2 \quad (4.1)$$

Die Auswertung nach BEYER wurde entsprechend den Tabellen in BEYER(1964) vorgenommen, die neben dem Durchmesser d_{10} auch d_{60} für die k_f -Wert-Ermittlung einbeziehen, mit Ungleichförmigkeitsgrad $U=d_{60}/d_{10}$ (s. Tabelle 4-1).

Darüberhinaus erbrachte die Auswertung von Berichtsquellen über früher durchgeführte k_f -Wert-Bestimmungen im Bereich des Neuwieder Beckens die in Tabelle 4-2 zusammengefassten Ergebnisse.

Die ermittelten k_f -Werte liegen demnach zwischen $1 \cdot 10^{-3}$ und $2 \cdot 10^{-2}$ m/s. Auffallend ist die gute Übereinstimmung zwischen Sieblinien- und Pumpversuchsauswertung, was z.T. Beobachtungen anderer Autoren widerspricht (z.B. ROVEY & CHERKAUER, 1995), die eine deutliche Skalenabhängigkeit zwischen den verschiedenen Methoden festgestellt haben. Demnach sollten Pumpversuche immer deutlich größere Werte als Sieblinienauswertungen ergeben.

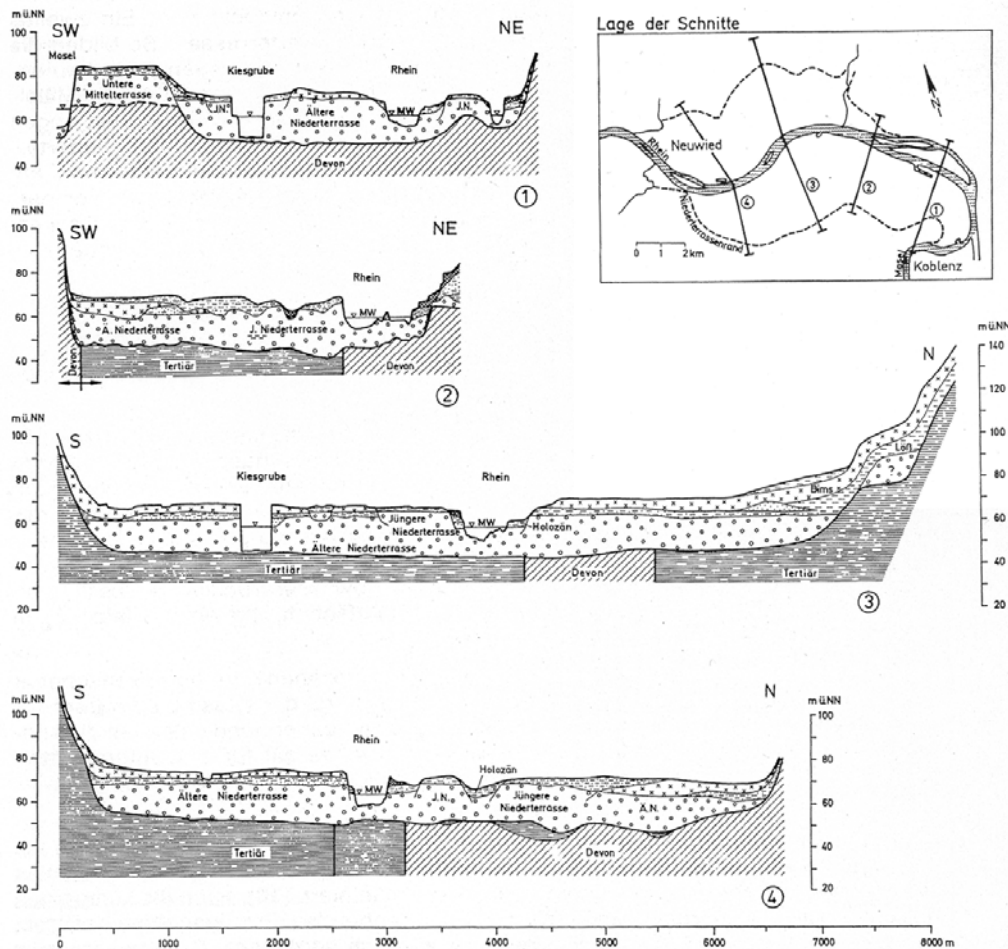


Abbildung 4-2: Geologische Schnitte durch das Neuwieder Becken.

Soft data-Generierung: Nach dem in Abschnitt 2.7.3 auf Seite 60 beschriebenen Verfahren wurden die Bohrprofilbeschreibungen in k_f -Werte transferiert und anschließend in 0,5m-Tiefenabschnitte unterteilt. Die Anzahl der so generierten Datensätze beträgt insgesamt ca. 16000. Eine Häufigkeitsdarstellung dieser k_f -Werte zeigt Abbildung 4-6.

Als Nebenprodukt der vorstehenden Auswertung ergibt sich der Verlauf der Basis des Grundwasserleiters. Abbildung 4-7 zeigt die Struktur, die sich aus der Interpolation der NN-Höhen ergibt, an denen in den Bohrprofilen ein genereller Wechsel von Lockergestein zu Ton oder Tonstein stattfindet. Deutlich sind einzelne Erhebungen und tieferliegende Bereiche zu erkennen. Letztere lassen sich mit geologischem Sachverstand zu Rinnen verbinden, die als frühere Flussläufe des Rheins interpretiert werden können. Die Mächtigkeit der Aquiferfüllung beträgt im Mittel 18-20m, wovon etwa 10-15m mit Grundwasser erfüllt sind.

Abbildung 4-6 zeigt, dass die Häufigkeitsverteilung der generierten k_f -Werte nicht mit einer üblicherweise vorausgesetzten Log-Normalverteilung beschrieben werden kann. Die hier vorliegende mehrgipflige Verteilung steht nicht in Wider-

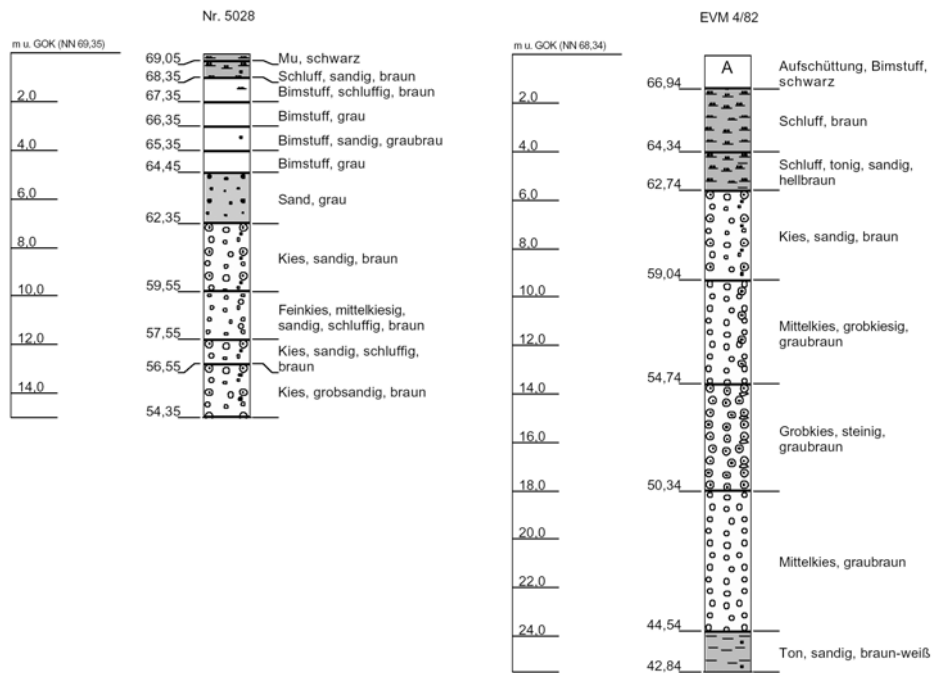


Abbildung 4-3: Typische Bohrprofile im Neuwieder Becken

spruch zu den Naturgegebenheiten, wie Untersuchungen an freistehenden Kiesgrubenaufschlüssen belegen. Hier ist zu erkennen, dass die gut durchlässigen Kiese eine Matrix bilden, in die einzelne Strukturkörper (die im Einzelfall mehr als 100 m Länge erreichen können) mit geringerer Durchlässigkeit unregelmäßig eingelagert sind. Die Matrix wird durch den Bereich zwischen $\ln(k_f) = -6$ bis -3 repräsentiert (ca. 8000 Werte). Die hohe Zahl von k_f -Werten im Bereich des Tons und Tonschiefers ($\ln(k_f)$ zwischen -17 und -16) rührt daher, dass die Auswertung für alle Profile bis 20 m unter die Geländeoberkante durchgeführt wurde und in vielen Fällen schon einige Meter vor Erreichen dieser Tiefe die Aquiferbasis, die immer als Ton oder Tonstein ausgebildet ist, angetroffen wurde. Tonlinsen treten jedoch auch vereinzelt innerhalb des Grundwasserleiters selbst auf. Eine Plausibilisierung der generierten Daten wurde mit den Werten aus den sonstigen Quellen durchgeführt (Siebkurven, Pumpversuche, Laborversuche).

4.1.3 Konzentrationsdaten aus der Sanierung

Hier wird auf Daten zurückgegriffen, die im Verlaufe einer Industriegebietssanierung im Bereich des Neuwieder Beckens gewonnen wurden. Eine Übersicht über dieses Gebiet mit der Lage aller verwendeten Messstellen gibt Abbildung 4-9.

Die verwendeten Grundwasseranalysendaten wurden im Zeitraum 1984 bis 1988 gewonnen. Als konkreter Startzeitpunkt für die Transportmodellrechnungen wurde der 4. Juni 1984 gewählt, ein Vergleich der Modellergebnisse mit den Analyse-

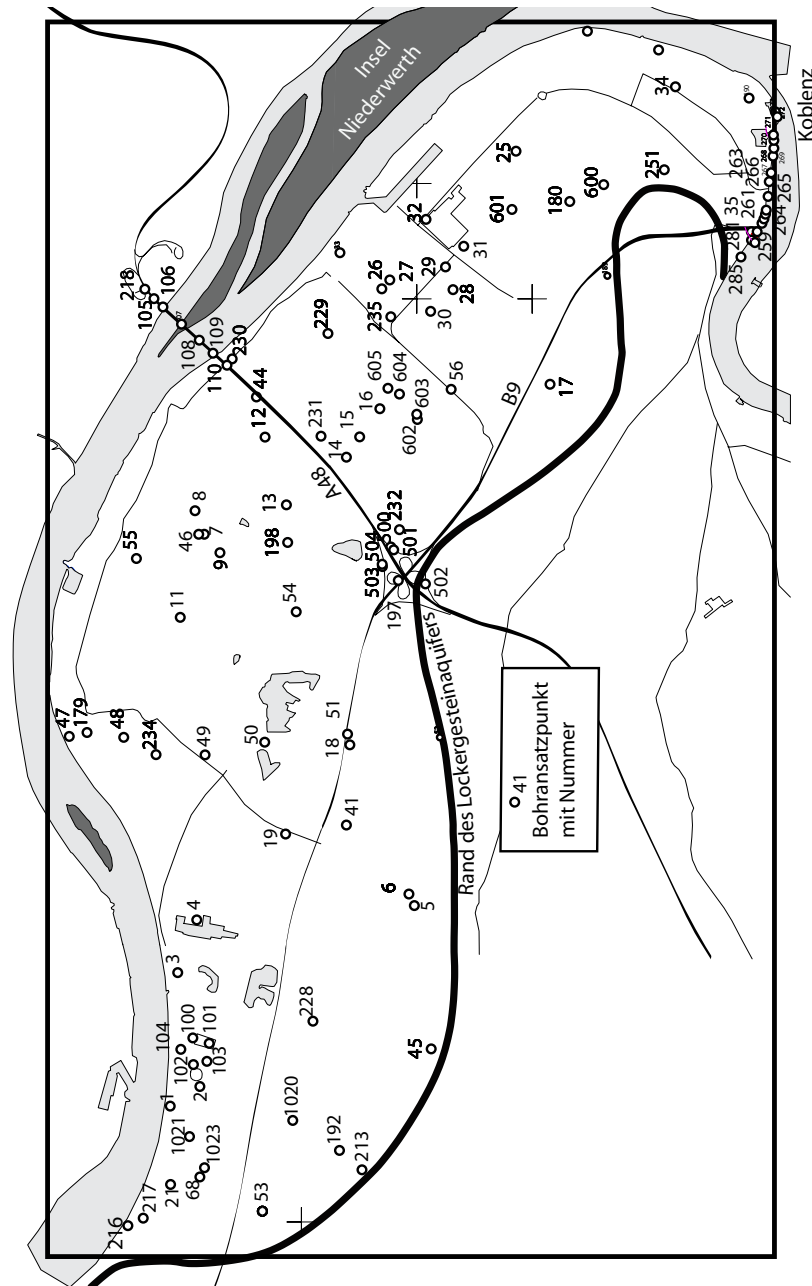


Abbildung 4-4: Lage des Untersuchungsgebietes mit Bohransatzpunkten

Messwerten wurde dann für den 1. April 1986 durchgeführt. An beiden Zeitpunkten liegt eine relativ flächendeckende Erfassung der Schadstofffahne vor. Die verfügbaren Analysen betreffen hauptsächlich drei chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW): Trichlorethen (Tri), Tetrachlorethen (Tetra) und 1.1.1-Trichlorethan. Für eine Modellierung am aussagestärksten im Hinblick auf die Höhe der gemessenen Konzentrationen erschien Tri, so dass die Untersuchungen sich hierauf konzentrierten.

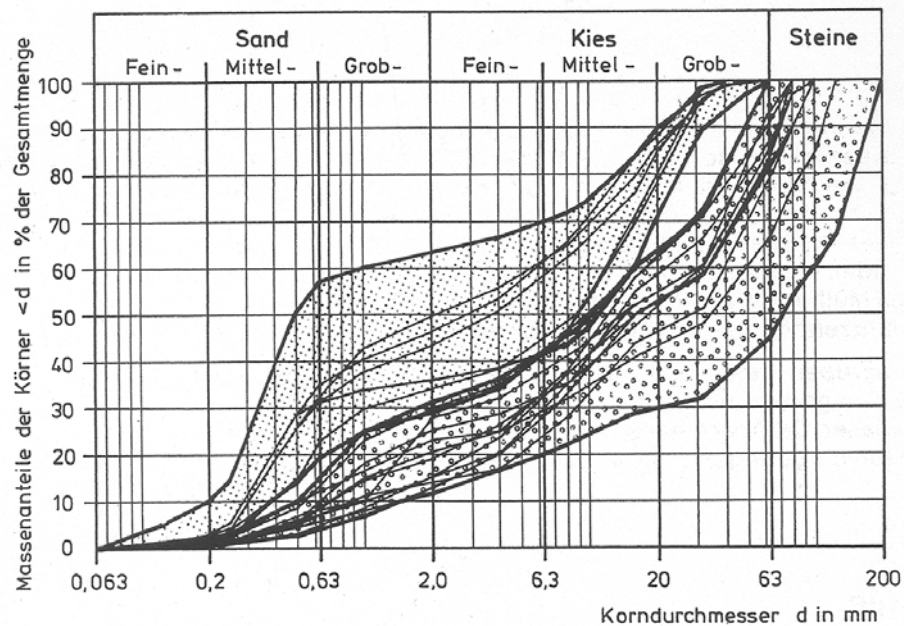


Abbildung 4-5: Typische Kornsummenlinien im Neuwieder Becken. (Aus GIEBEL et al., 1990)

Tabelle 4-1: Auswertung von Kornsummenlinien

Nr. der Sieblinie aus Abb. 4-5	d ₁₀ [mm]	d ₆₀ [mm]	U [-]	k _f -Wert [m/s] Auswertung nach HAZEN	k _f -Wert [m/s] Auswertung nach BEYER
1	0.2	1.0	5	$4.64 \cdot 10^{-4}$	$3.2 \cdot 10^{-4}$
2,3,4	0.3	5.0	16.6	$1.04 \cdot 10^{-3}$	$6.3 \cdot 10^{-4}$
5	0.3	15	50	$1.04 \cdot 10^{-3}$	$6.3 \cdot 10^{-4}$
6	0.4	15	37.5	$1.86 \cdot 10^{-3}$	$9.6 \cdot 10^{-4}$
7	0.5	15	30	$2.9 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$
10	1.4	100	71	$2.2 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$

d₁₀ = Korngröße bei der die Summenkurve den 10%-Punkt der Ordinate schneidet

d₆₀ = Korngröße bei der die Summenkurve den 60%-Punkt der Ordinate schneidet

Tabelle 4-2: : Ermittelte k_f -Werte für das Neuwieder Becken aus Literaturrecherchen

Quelle	Methode	Ort	k_f -Wert [m/s]	nutzbares Porenvolumen [-]
Schwille, 1960	Siebkurve nach SICHARDT	Brunnen, Neuwied	$5 \cdot 10^{-3}$	0.25
Schwille, 1971	Pumpversuch	Br. I, Rheinhöhen	$2 \cdot 10^{-2}$	
Björnsen, BCE	Pumpversuch	Nettetal, Wasserwerk Feldfrieden	$6.7 \cdot 10^{-3}$	
Schwille, 1982	Pumpversuch		$4 \cdot 10^{-3}$ bis $2 \cdot 10^{-2}$ (H=10-12m)	
Frings, unbek.	unbek.	unbek.	$1 \cdot 10^{-3}$ bis $1.3 \cdot 10^{-2}$	
	unbek.	Kernkraftwerk	$1.6 \cdot 10^{-2}$	0.20

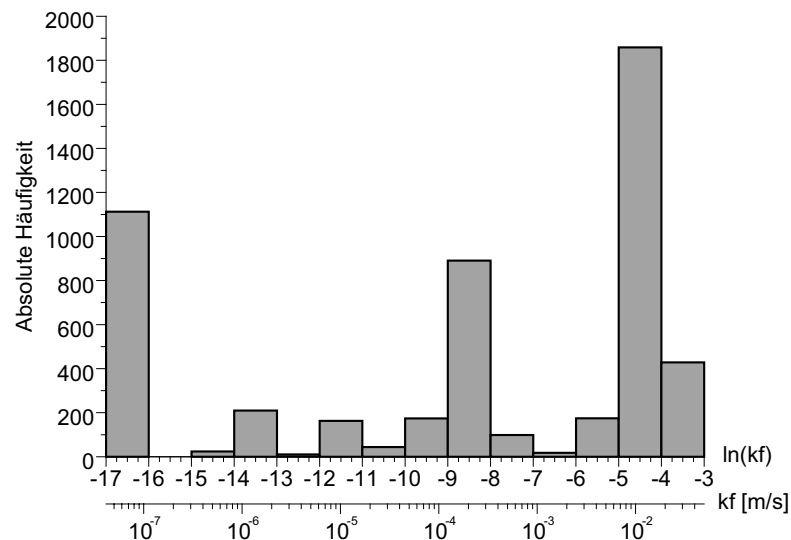


Abbildung 4-6: Absolute Häufigkeiten der sich aus der soft data-Generierung ergebenden hydraulischen Durchlässigkeiten

Die mit dem Kriging-Verfahren interpolierte flächige Konzentrationsverteilung für den Startzeitpunkt der Modelluntersuchungen zeigt Abbildung 4-11, der Vergleichszustand ist in Abbildung 4-12 dargestellt. Tiefendifferenzierte Analysenwerte sind nur spärlich vorhanden, die verfügbaren Daten zeigen in der Mehrzahl der

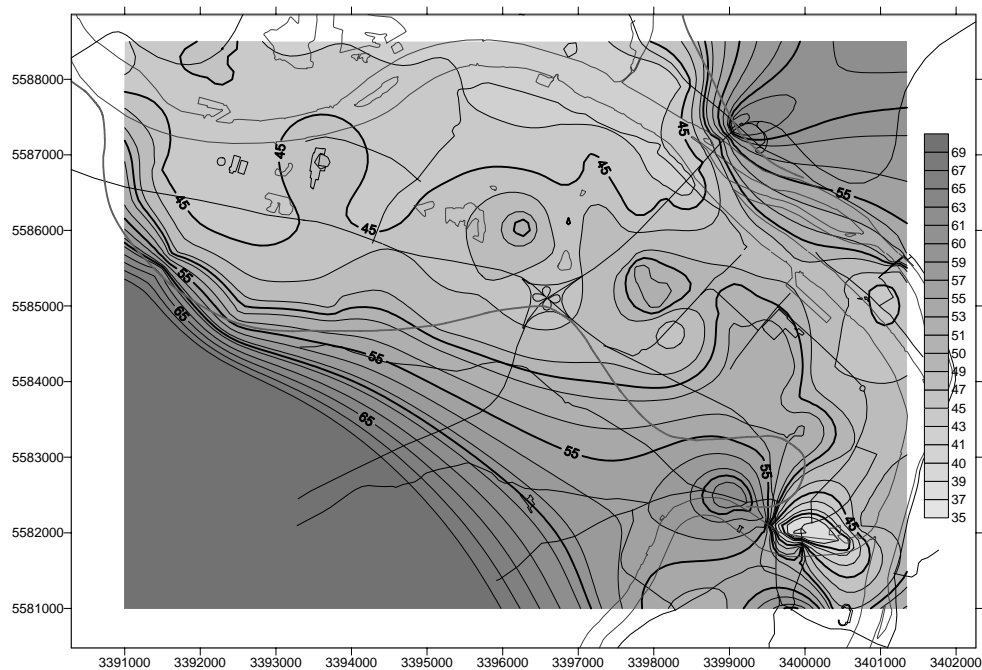


Abbildung 4-7: Höhenlage der Basis des Grundwasserleiters

Fälle eine über den oberen Teil der Aquifermächtigkeit konstante Belastung an. Für die Modellierung wurde deshalb als Anfangsbedingung eine 'Tri-Fahne' mit konstanten Werten in den obersten 5-7m des grundwassererfüllten Aquifers vorgegeben. Da dieser konstruierte Anfangszustand entscheidenden Einfluss auf das Ergebnis der Modellrechnungen hat, die Interpolation der gemessenen Werte aber eine gewisse Unsicherheit beinhaltet, wurde Wert auf eine möglichst plausible räumliche Verteilung der Konzentrationen gelegt. In den Auswertungen zur Unsicherheitsbetrachtung wurde der Einfluss des Anfangszustandes nicht berücksichtigt, da vor allem eine relative Eignung der Verfahren untereinander ermittelt werden sollte. Das SUFIX-Verfahren erlaubt jedoch prinzipiell, im Schritt SUFIX 3 als unsicheren Parameter auch den Anfangszustand einzubeziehen. Zur Problematik der Konstruktion von flächigen Verteilungen von Stoffkonzentrationen auf der Grundlage von Punktmessungen in unterschiedlichen Tiefen s. z.B. TOUSSAINT (1994). Dennoch ist bedingt durch den relativ homogenen Aufbau des Untergrundes und das dichte Messnetz die Konstruktion eines Iso-Planes der Konzentrationen erlaubt.

Beispiele für Konzentrationsganglinien an vier Messtellen zeigt Abbildung 4-10. Hier ist deutlich die Datenlücke zwischen dem Anfangszustand (4.6.1984) und dem Vergleichszustand für die Berechnungen (1.4.1986) zu erkennen

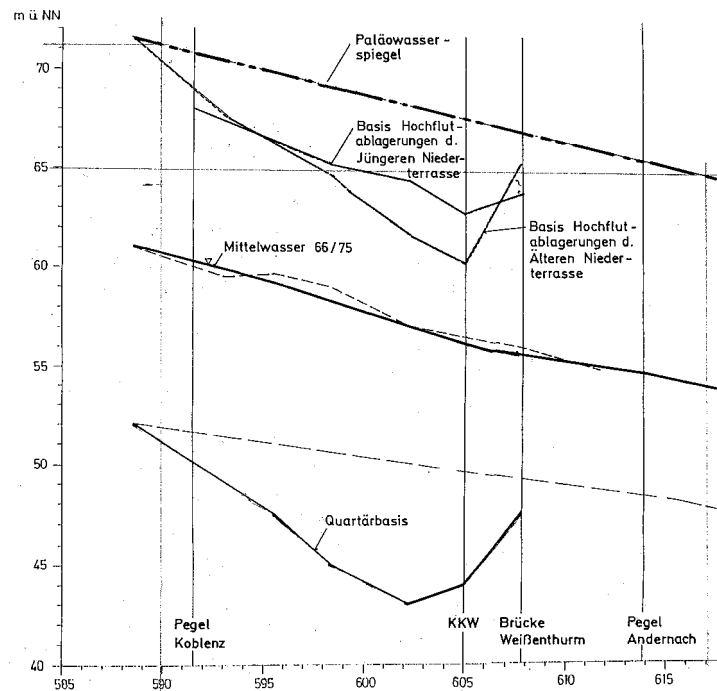


Abbildung 4-8: Paläowasserspiegel des Rheins im Bereich des Neuwieder Beckens

4.2 Hydrogeologisches Modell

Für die Untersuchungen wurde nur der linksrheinische Teil des Untersuchungsgebietes als Modellgebiet ausgewählt. Dies geschah aus drei Gründen:

- (a) Der Rhein stellt eine hydraulische Grenze für das oberflächennahe Grundwasser dar, d.h. es kann kein Grundwasser den Rhein unterströmen. Ein in das Grundwasser eingebrachter Stoff, dessen Ausbreitungsverhalten untersucht werden soll, kann sich deshalb nicht bis zur jeweils anderen Rheinseite bewegen.
- (b) Die von vornherein als relevant in Betracht gezogenen Szenarien für Schadstoffausbreitungsberechnungen beziehen sich auf lokale Schadensereignisse mit Punkt- oder Linienquellen. Es wird also kein diffuser Stoffeintrag auf großen Flächen untersucht.
- (c) Lokale Ausbreitungsuntersuchungen müssen aber in der Regel alle 3 Dimensionen berücksichtigen, womit aus rein modelltechnischen Gründen die maximal mögliche Anzahl der Modellknoten pro "Modellschicht" gegenüber horizontal-ebenen (d.h. einschichtigen) Berechnungen um die Zahl der Schichten als Faktor reduziert wird.

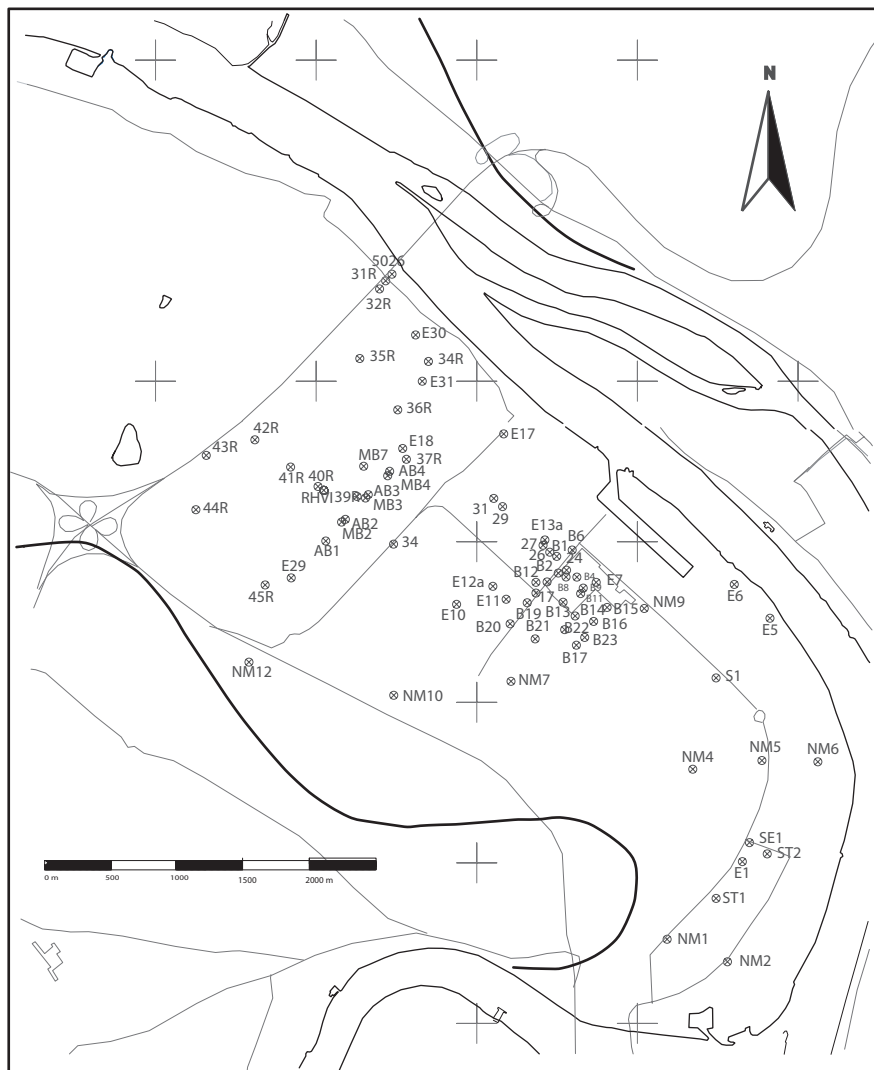
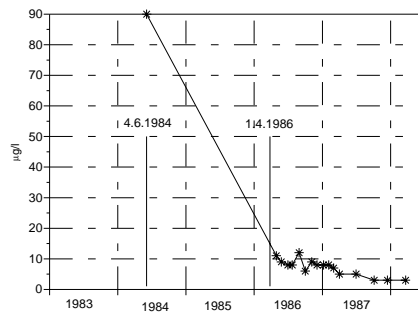


Abbildung 4-9: Näheres Untersuchungsgebiet mit Lage der Messstellen für Konzentrationsmessungen im Grundwasser

Daneben muss gerade bei Transportberechnungen gegenüber reinen Strömungsberechnungen der räumliche Diskretisierungsabstand (Netz-knotenabstand) deutlich kleiner gewählt werden.

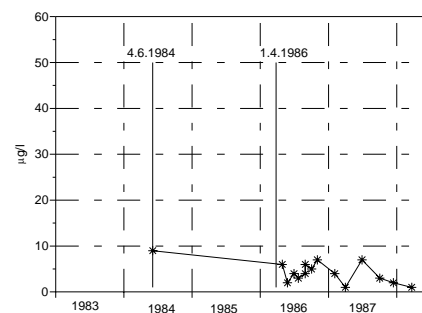
Auch in diesem Beispielfall wurde deshalb für alle Szenarien als deterministische Komponente eine Tiefendifferenzierung des Modells vorgegeben. Hierzu wurde zuerst auf der Grundlage des gesamten *soft data*-Datensatzes eine tiefenabhängige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der unterschiedlichen Körnungsstufen ermittelt und anschließend die Häufigkeitsverteilung der k_f -Werte in den gewählten Tiefenstufen berechnet.

Die Analyse der Variabilität der Durchlässigkeiten in Abhängigkeit von der Tiefe unter Gelände wurden so durchgeführt, daß aus der Häufigkeitsverteilung der



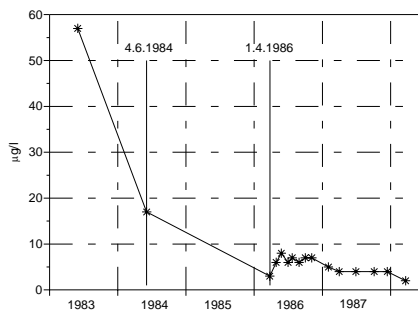
02/03/03 16:11:15 D:\neuwied\conc-dat\17.spf

a) Mst. 17



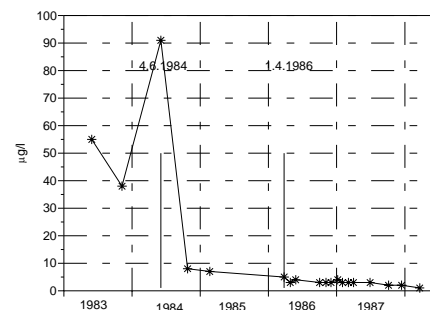
02/03/03 16:10:44 D:\neuwied\conc-dat\29.spf

b) Mst. 29



02/03/03 16:12:40 D:\neuwied\conc-dat\36r.spf

c) Mst. 36r



02/03/03 16:31:58 D:\neuwied\conc-dat\brhv.spf

d) Br. RH V

Abbildung 4-10: Konzentrationsverläufe (Tri) an vier ausgewählten Messstellen im Sanierungsgebiet.

k_f -Werte (Abbildung 4-6) vier Intervalle festgelegt wurden, die typische Strukturen des Untergrundes repräsentieren (Tabelle 4-3). Zur Unterstützung wurden auch Auswertungen entlang von geologischen Schnitten durchgeführt (BfG-0964, 1996).

Die Ergebnisse dieser Wahrscheinlichkeitsanalyse für das Auftreten bestimmter Durchlässigkeitsbereiche sind in Abbildung 4-13 dargestellt. Abbildung 4-13a zeigt, dass die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Grobkies maximal bei ca. 14% liegt. Dieser Maximalwert wird aber nur im Tiefenbereich zwischen 48 und 55 m+NN erreicht. Fein- und Mittelkies wird vor allem zwischen 52 und 59 m angetroffen (Abbildung 4-13b). Die Wahrscheinlichkeit hierfür ist mit über 60% relativ groß. Sande werden dagegen vorwiegend oberhalb von 58 m+NN erbohrt, wobei die Wahrscheinlichkeit mit der Höhe über NN stetig zunimmt und bei 70 m+NN ein Maximum von ca. 60% erreicht wird. Wie zu erwarten liegen die höchsten Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Ton und Tonstein im Bereich der Aquiferbasis, die im Mittel bei etwa 45 m+NN liegt. Aber auch im Tiefenbereich zwischen 60

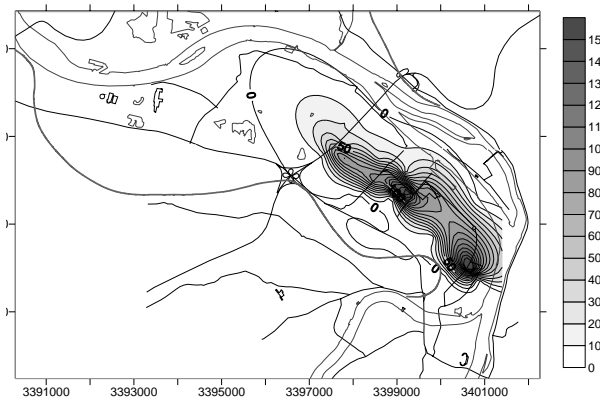


Abbildung 4-11: Interpolierte Konzentrationen zu Beginn der Messkampagne (6.4.1984, Werte für Tri in µg/l)

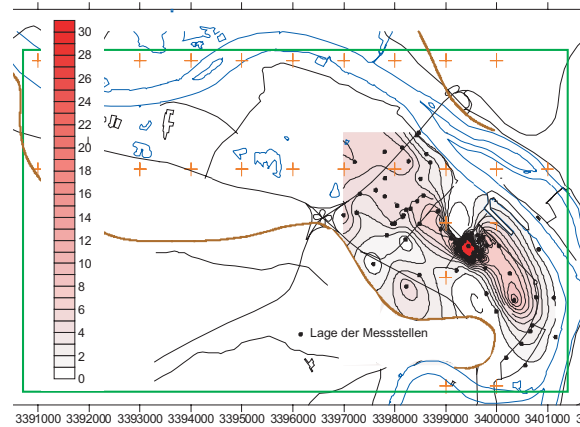


Abbildung 4-12: Interpolierte Konzentrationen am Ende der Messkampagne (1.4.1986, Werte für Tri in µg/l)

Tabelle 4-3: Intervalle für die Berechnungen der Auftretenswahrscheinlichkeiten von typischen Untergrundstrukturen

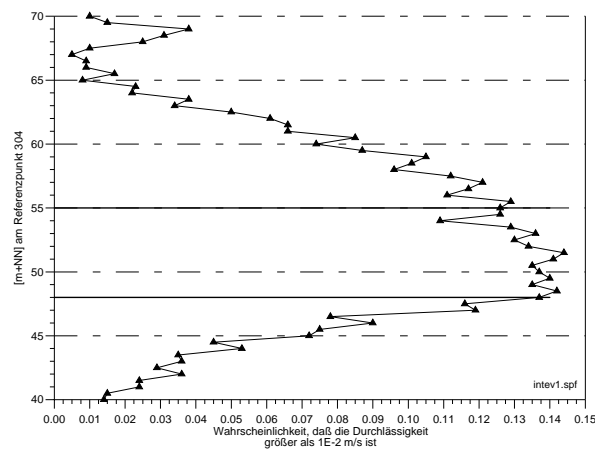
	Intervall1	Intervall2	Intervall3	Intervall4
k_f -Wert [m/s]	$> 1 \times 10^{-2}$	$6 \times 10^{-4} - 1 \times 10^{-2}$	$5 \times 10^{-6} - 6 \times 10^{-4}$	$< 1 \times 10^{-6}$
	sehr große Durchlässigkeit	große Durchlässigkeit	mittlere Durchlässigkeit	geringe Durchlässigkeit
	Grobkies	Fein-/Mittelkies	Sand	Schluff, Lehm, Ton(stein)
typische Struktur	Kiesmatrix		Einlagerungen in Kiesmatrix, Aquiferbasis	

und 70 m+NN treten mit einer Wahrscheinlichkeit von über 20% Schluff- und Toneinlagerungen auf.

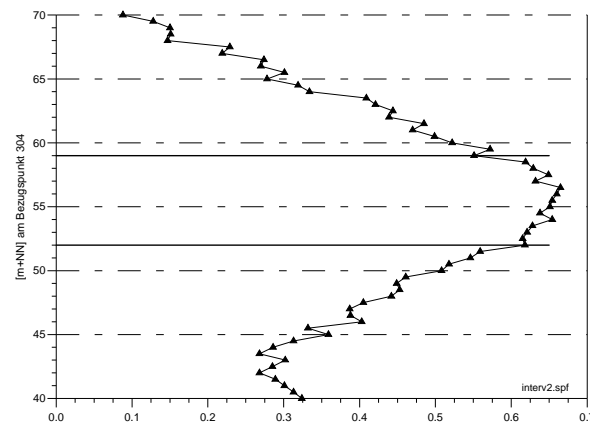
Für das hydrogeologische Modell wurde auf der Grundlage dieser Auswertung die in Tabelle 4-4 gezeigte Tiefendifferenzierung gewählt.

4.3 Numerisches Modell

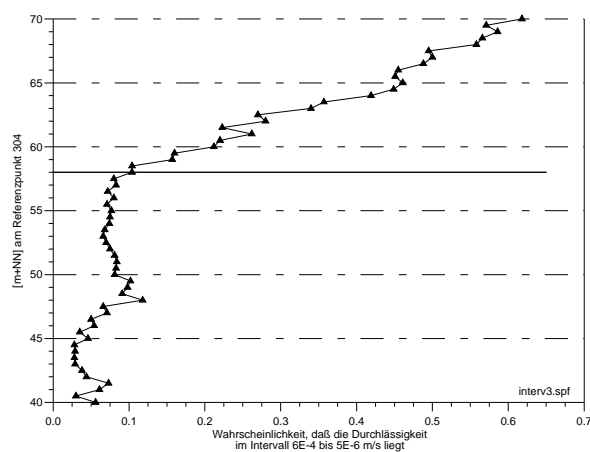
Die Diskretisierung in der horizontalen Ebene wurde mit einem konstanten Knotenabstand von 100m vorgenommen. Bei 107 Spalten und 63 Zeilen ergeben sich pro Schicht 6741 Knoten. Die Lage der Zwischenschichten wurde per Programm generiert, wobei ein Gefälle von 0,22 Promille vonOSO nach WNW berücksichtigt wurde. Die Anzahl der Modellschichten beträgt nur 5, obwohl die Tiefenvariabilität anhand von 6 Schichten beschrieben wurde. Die Schicht 0 wurde für die Modellrech-



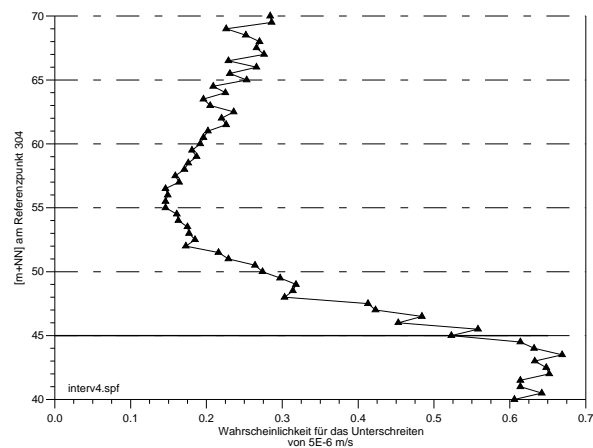
a) Tiefenabhängige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Grobkies



b) Tiefenabhängige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Fein- und Mittelkies



c) Tiefenabhängige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Sanden (allg.)



d) Tiefenabhängige Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Schluff/Ton und Tonstein

Abbildung 4-13: Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der in Tabelle 4-3 genannten Indikatorbereiche

Tabelle 4-4: Schichteneinteilung des hydrogeologischen Modells

Schichtnummer	Tiefenbereich von-bis [mm+NN] bezogen auf Bohrpunkt 304
0	66-70
1	62-66
2	58-62
3	54-58
4	50-54
5	46-50

nungen nicht verwendet, da die Datenauswertung zeigte, dass sie unter keinen hydrologischen Bedingungen durchströmt werden kann. Sie wäre also nur für Rechnungen interessant, in denen die ungesättigte Zone integriert ist. Schicht 1 wurde entsprechend als oberste Modellschicht angesehen (s. Abbildung 4-14). Die Gesamtzahl der Knoten im Modell beträgt damit $5 \cdot 6741 = 33705$ Knoten. Der Rhein als prägende Randbedingung für die Grundwasserströmungs-Verhältnisse wurde mittels vorgegebenen Festpotentialen im Modell berücksichtigt. Als weitere wichtige hydraulische Größen wurden eine Vielzahl von Brunnen integriert, wobei vor allem die Entnahmen der Wasserwerke eine besondere Bedeutung besitzen. Für sämtliche Entnahmen wurden langfristig gemittelte Werte im Modell verwendet. Abbildung 4-15 zeigt die gewählte Geometrie der Modellberandung und die horizontale räumliche Diskretisierung des numerischen Modells.

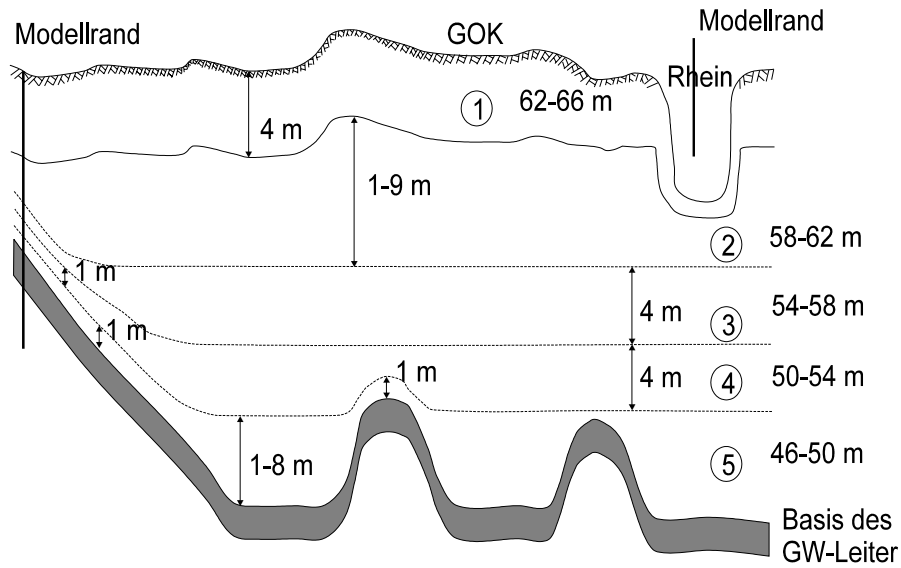


Abbildung 4-14: Vertikale räumliche Diskretisierung des numerischen Modells

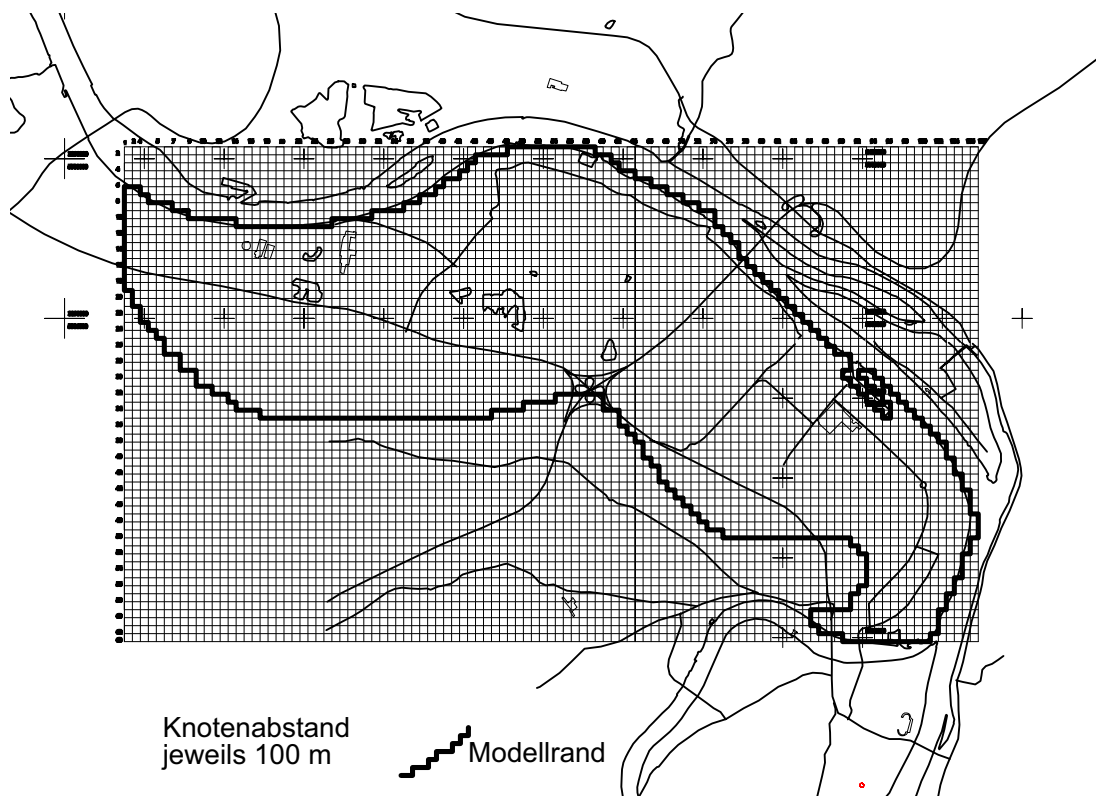


Abbildung 4-15: Horizontale räumliche Diskretisierung des numerischen Modells

4.4 Anwendung des SUFIX-Verfahrens zur Unsicherheitsanalyse

4.4.1 Generierung der soft data aus Bohrbeschreibungen

Die Generierung wurde bereits bei der Auswertung der Daten zu den geologischen Verhältnissen beschrieben (s. Abschnitt 4.1.2).

4.4.2 Variographie

Als Besonderheit gegenüber einer rein statistisch ausgelegten Variogrammanalyse konnten hier auch geologische (deterministische) Grundinformationen des Untersuchungsgebietes mitberücksichtigt werden. Es ist bekannt, dass sich Sedi-mentstrukturen am Verlauf des zugehörigen Oberflächengewässers orientieren; d.h., dass zum einen ihre Längserstreckung grösser ist als ihre Breitenausdehnung und zum anderen die Längsachse der Strukturen mehr oder weniger mit der Fliessrichtung des Gewässers übereinstimmt. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass sich die jetzige Fliessrichtung im Laufe geologischer Zeiträume geändert haben kann. Frühere Flussverläufe können sich als Rinnenstrukturen in der Aquiferbasis widerspiegeln und sind dann aus den Bohrprofilen rekonstruierbar. Die hier durchgeführten Variogrammanalysen orientieren sich am derzeitigen Rheinverlauf, der mit einem Richtungswinkel von ca. 150 Grad nach WNW zeigt.

Neben der *a priori*-Information über die bevorzugte Ausdehnung der durch die Variogrammanalyse zu findenden Untergrundstrukturen in der horizontalen Ebene gibt es auch Anhaltspunkte für eine bevorzugte Orientierung eventueller Schichtungen in der Tiefe, geologisch als "Fallen" von Schichten bezeichnet. Der Fallenwinkel wird hier gleich dem Gefälle des Paläowasserspiegels angenommen, der aus dem Verlauf der derzeitigen Quartärbasis und dem Mittelwasserniveau des Rhein abzuleiten ist (s. Abbildung 4-8). Der Fallenwinkel beträgt danach 0,22 Promille. Die räumliche Lage sämtlicher 16000 Datenpunkte aus der *soft data*-Auswertung wurde dementsprechend auf der Basis dieser Überlegungen per Programm angepasst, indem die Punkte, die wahrscheinlich zu einer Struktureinheit gehören, auf die gleiche horizontale Ebene angehoben wurden (s. Abbildung 4-16).

Ergebnisse der Variogrammanalysen

Horizontale Variogrammauswertungen

Für die Variogrammauswertung wurden nur diejenigen Werte berücksichtigt, die den Aufbau des Lockergesteinsaquifers charakterisieren. Alle Werte der Profile, die der Aquifersohle zugerechnet werden müssen, wurden aus den Datensätzen entfernt. Die nachfolgenden Abbildungen (4-17 bis 4-20) zeigen die Verteilung der verbleibenden k_f -Werte in den einzelnen Modellschichten. Mit diesen Werten wurden die Variogrammberechnungen durchgeführt.

Die Variogramme sind in den Abbildungen 4-22 bis 4-25 dargestellt. Um die horizontale Richtungsabhängigkeit der Untergrundstrukturen zu erfassen, wurden

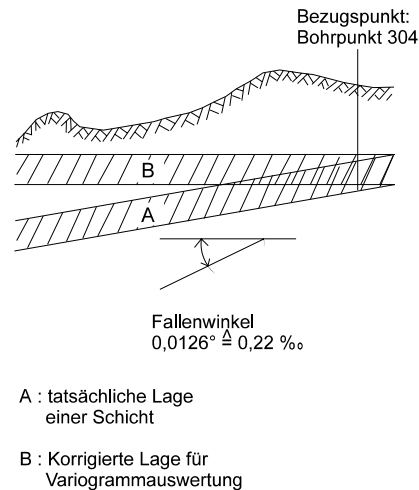


Abbildung 4-16: Modifikation der Tiefenkoordinate entsprechend dem Fallenwinkel

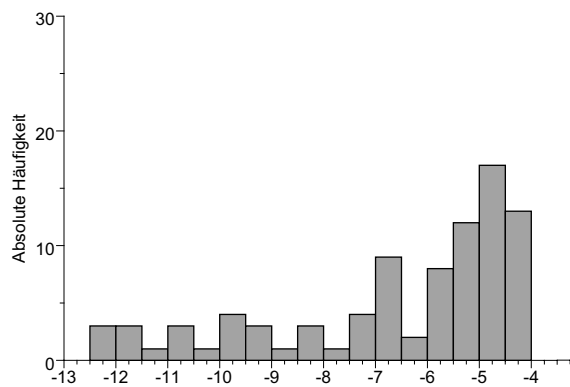


Abbildung 4-17: Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 1 (62-66m+NN)

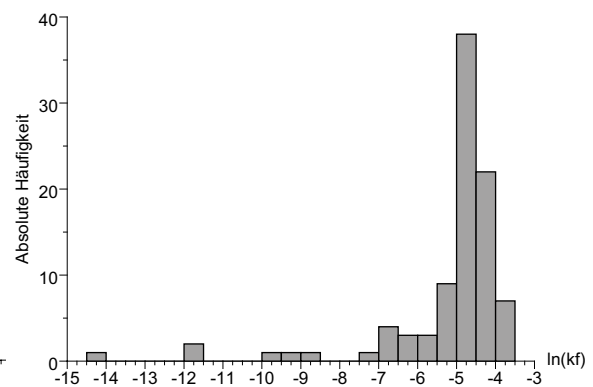


Abbildung 4-18: Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 2 (58-62m+NN)

die Auswertungen für jede Schicht in vier Richtungen vorgenommen (15,60,105,150 Grad). Gezeigt werden nur die Variogrammauswertungen in der 150° Richtung, da, wie zu erwarten, hier die räumlichen Abhängigkeiten zwischen den Bohrpunkten eindeutig am höchsten sind.

Gut zu erkennen ist die mit der Tiefe deutlich zunehmende räumliche Korrelation der Durchlässigkeiten. In der obersten Schicht (66-70m) liegt ein reiner Nugget-Effekt vor, d.h. es gibt entweder keine räumlichen Abhängigkeiten oder diese sind nur bis zu einem Abstand zwischen zwei Punkten wirksam, der unterhalb der hier gewählten Klassenbreite von 100 m liegt. Der Variogrammverlauf in der untersten Schicht (46-50m) kommt dagegen nahe an die Idealvorstellung eines Variogramms heran, da hier eine fast kontinuierliche Erhöhung des Variogrammwertes mit dem Abstand zwischen zwei Bohrpunkten bis zu einem konstanten Endwert (der Gesamtvarianz des Datensatzes) deutlich zu erkennen ist. Hinzuweisen ist auf den relativ

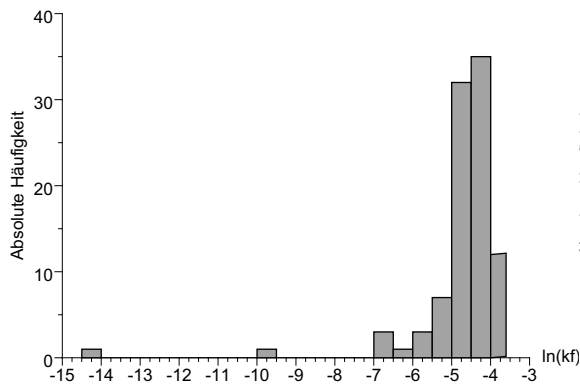


Abbildung 4-19: Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 3 (54-58m+NN)

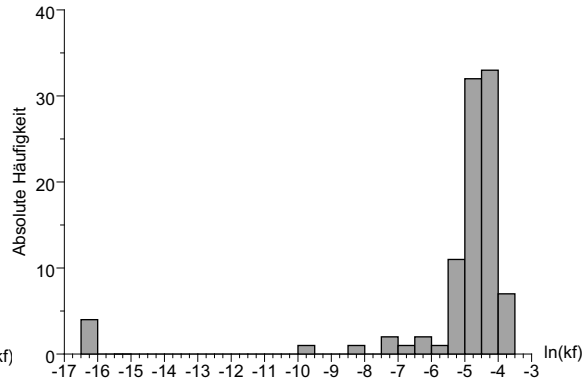


Abbildung 4-20: Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 4 (50-54m+NN)

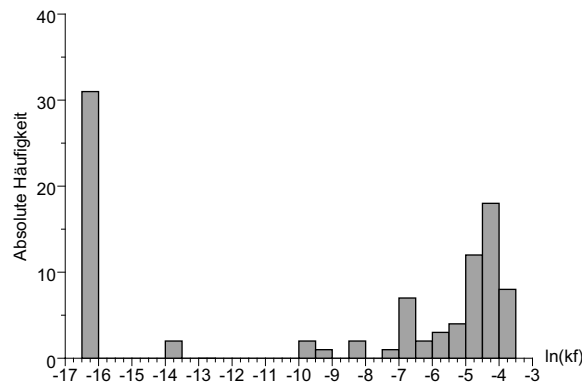


Abbildung 4-21: Absolute Häufigkeiten der $\ln(k_f)$ -Werte in Schicht 5 (46-50m+NN)

kleinen Nuggetwert im Verhältnis zur Gesamtvarianz in fast allen Schichten. Dies gibt einen deutlichen Hinweis darauf, dass die Reproduzierbarkeit der Berechnung von k_f -Werten aus Bohrbeschreibungen sehr gut ist.

Die Reichweiten der räumlichen Abhängigkeiten als stochastische Simulationsparameter konnten aus den Diagrammen abgeleitet werden. Die Reichweite senkrecht zur Hauptstreckungsrichtung der Untergrundstrukturen wurde aus den hier nicht dargestellten Variogrammen für die 60°-Auswertung abgelesen. Der ebenfalls erforderliche Mittelwert und der Nuggetwert sind ebenfalls leicht zu berechnen bzw. aus den 150°-Diagrammen abzulesen. Schwierigkeiten bereitet dagegen die Ermittlung der Varianzen für die Simulation. Der verwendete Turning-Bands-Generator kann nur Normal-Verteilungen simulieren, d.h. die Eingabeparameter müssen eine Normalverteilung beschreiben, und als Ergebnis wird auch immer eine Normalverteilung generiert. Wie aus den Häufigkeitsdiagrammen für die k_f -Werte der einzelnen Schichten (Abbildungen 4-17 bis 4-21) zu erkennen ist, kann in keiner der fünf Schichten von einer Normalverteilung ausgegangen werden, die Datensätze zeigen

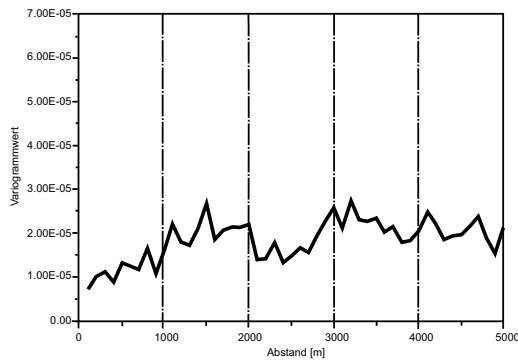


Abbildung 4-22: Variogramm der k_f Werte in Modellschicht 1 (62-66m+NN)

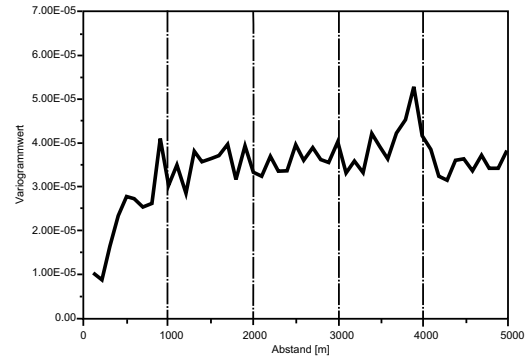


Abbildung 4-23: Variogramm der k_f Werte in Modellschicht 2 (58-62m+NN)

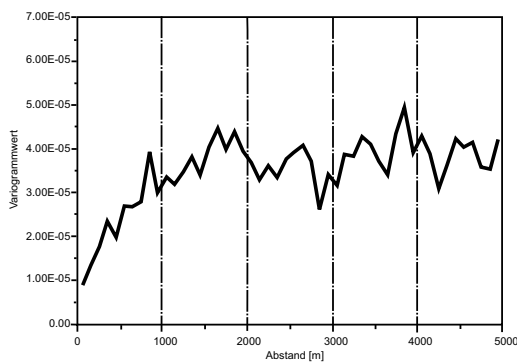


Abbildung 4-24: Variogramm der k_f Werte in Modellschicht 3 (54-58m+NN)

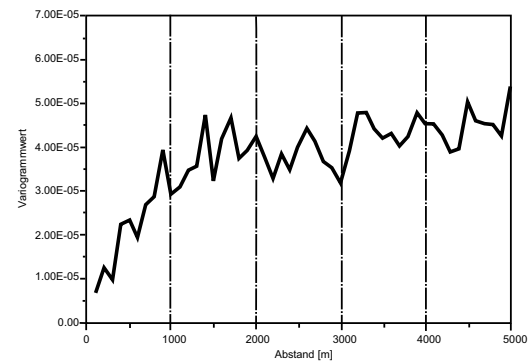


Abbildung 4-25: Variogramm der k_f Werte in Modellschicht 4 (50-54m+NN)

eher eine bimodale Verteilung. Die berechneten Varianzen für die nichttransformierten Daten liegen deshalb auf unrealistisch hohem Niveau (s. Tabelle 4-5). Die für die Gauss-basierenden Simulationen verwendeten Varianzen wurden deshalb aus den Variogrammen ermittelt, die nach einer *normal-score*-Transformation der Daten erstellt wurden.

Hierzu wird die Ausgangsverteilung in eine Normalverteilung transformiert (Transformation \mathbf{F}), mit diesem Datensatz werden Variogramme berechnet und anschließend wird die Simulation durchgeführt. Die transformierten Daten haben den Mittelwert $\bar{Y} = 0$ mit $Y = \ln(k_f)$ und die Varianz 1. Zum Schluss werden die Simulationsergebnisse mit der inversen Transformation \mathbf{F}^{-1} wieder in die ursprüngliche Ausgangsverteilung überführt.

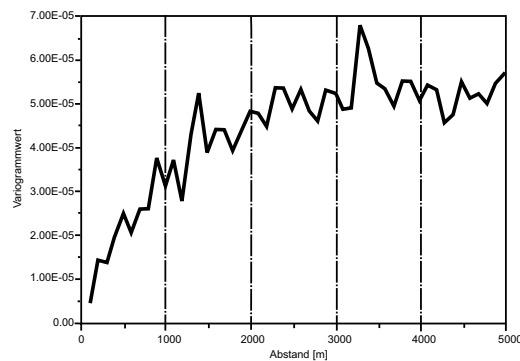


Abbildung 4-26: Variogramm der k_f -Werte in Modellschicht 5 (46-50m+NN)

Die Variogrammberechnungen erfolgten dann anschließend mit dem Programm GAMV3 (DEUTSCH & JOURNEL, 1992), das als Eingabedaten beliebig im 3-D-Raum verteilte Werte zulässt. Es ist hiermit also eine vollständig räumliche Auswertung möglich. Als z-Koordinate (neben den Lagekoordinaten Rechts- und Hochwert) wurde die NN-Höhe der Schichten verwendet, die bereits mit dem *a priori* bekannten Fallen-Winkel korrigiert wurde.

In den Abbildungen 4-27 und 4-28 sind jeweils die Variogramme des Gesamtdatensatzes für verschiedene Richtungen, dargestellt einmal auf der Grundlage der Original k_f - Werte und zum anderen mit den *normal-score*-transformierten Werten. Erkennbar ist, dass in beiden Fällen die 120° -Richtung eine relativ gute Abgrenzung der Reichweiten erlaubt (außerhalb derer keine Korrelation zwischen den Messpunkten mehr erkennbar ist). Die größte ablesbare Reichweite, die man den größten Strukturen zuordnen kann, beträgt in beiden Fällen etwa 1400-1500 m. Unterstrukturen sind bei 700 m (Originaldaten) bzw. bei 400 m (transformierte Daten) zu erkennen. Noch kleinere Strukturen können mit Reichweiten von etwa 200 m eingesetzt werden.

Der für die Simulationen ebenfalls anzugebende Nugget-Effekt liegt bei etwa 0,1 bis 0,2. Die Gesamtvarianz (*sill*) aller Variogramme liegt bedingt durch die Art der Transformation bei 1,0. Für die Gauss-Simulationen ist es möglich, diese Gesamtvarianz aufzuspalten in Varianzanteile, die jeder Unterstruktur zuzuordnen sind (s. Tabelle 4.1).

Die Verteilung der k_f - Werte im Neuwieder Becken zeigt eine deutliche Tiefenabhängigkeit. Um diese ebenfalls *a priori* bekannte und damit als deterministisch anzusehende Komponente der Durchlässigkeitsverteilung bei der Simulation berücksichtigen zu können, wurde für jede der fünf Schichten eine getrennte *normal-score*-Transformation durchgeführt. Die dabei generierten Transformationstabellen wurden später für die schichtspezifischen Rücktransformationen der Simulationsergebnisse verwendet.

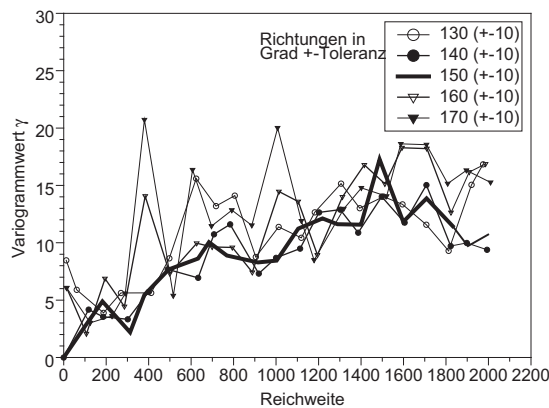


Abbildung 4-27: Variogramme Gesamtdatensatz, untransformiert

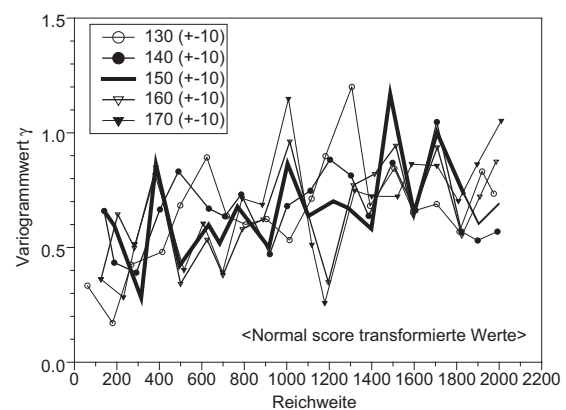


Abbildung 4-28: Variogramme Gesamtdatensatz, normal-score transformiert

Tabelle 4-5: Statistische Kennwerte und Variogrammparameter

	Schicht 0	Schicht 1	Schicht 2	Schicht 3	Schicht 4	Schicht 5
Mittelwert $\ln(k_f)$	-8.8	-7.8	-6.6	-6.4	-7.0	-8.6
Reichweite [m], 150°/60°	400/200	1200/600	900/500	1500/700	1200/600	3000/800
Gesamtvarianz (berechnet)	11	12	14	16	19	27
Nugget (untransformiert/transformiert)	1	1	1	1	1	1

4.4.3 Propagationsspfad TB

Ausgangspunkt dieses Propagationsspfades ist die Generierung der *soft data* aus den Bohrbeschreibungen (SUFIX 1A). Hier wird jedoch abweichend von der Fallstudie 1 keine Unsicherheitsverteilung an den einzelnen Bohrpunkten berücksichtigt. Stattdessen wird wie im klassischen Monte Carlo Ansatz üblich die Unsicherheitsbetrachtung auf die Generierung der Heterogenitätsabbildungen mittels des Turning-Bands-Verfahrens verlagert.

Es wurden 20 Simulationen mit der Software TB3D (DEUTSCH & JOURNAL, 1992) erstellt. Zum einen wurden die Simulationen 'roh' verwendet, d.h. die Abbildung der Heterogenität beruht nur auf den geostatistischen Parametern. Darüber hinaus wurden diese Simulationen auch mit den *soft data*-Werten konditioniert. Hierzu wurde das Verfahren von FOUQUET (1994) (s. a. Abschnitt D.3.2 auf Seite 215 im Anhang) eingesetzt. Beispiele für die konditionierten Turning-Bands-Simulationen zeigen die Abbildungen C-1 bis C-5. Die Schicht 1 zeigt, infolge der vorhandenen Deckschichten, einen deutlich höheren Anteil an weniger durchlässigen Bereichen als die Schichten 2 bis 4. Die Schicht 5 zeigt ebenfalls einen großen

Anteil an praktisch undurchlässigen Bereichen. Diese rühren daher, dass in dieser Tiefe in den ausgewerteten Bohrungen sehr oft bereits die Aquifersohle erbohrt wurde. In den Schichten 1 und 5 sind in den rechten und oberen Bereichen Rinnenstrukturen ansatzweise zu erkennen. Die vier Schritte der SUFIX Anwendung sehen zusammengefasst wie folgt aus (s. Abbildung 4-29):

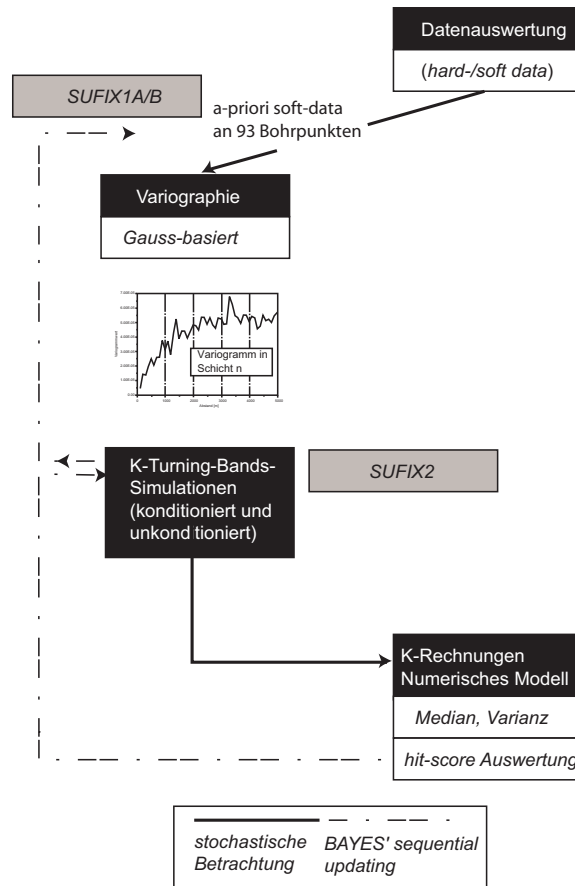


Abbildung 4-29: Prinzipieller Ablauf des SUFIX-Verfahrens im Propagationspfad TB

SUFIX1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte

SUFIX1B: Es wird keine statistische Verteilung an den Bohrpunkten auf Grundlage der generierten k_f -Werte eingeführt.

Variogramm: Für die fünf Modellschichten wird mit den 93 *soft data*-Werten jeweils eine Variogrammanalyse vorgenommen. Diese Analyse verwendet die *normal-score*-transformierten Werte der *soft data*, da die nachfolgenden Generierung der stochastischen Simulationen nur für normal verteilte Daten durchgeführt werden kann.

SUFIX2: Die Turning-Bands-Simulationen liefern demzufolge Heterogenitätsabbildungen mit dem Mittelwert Null und der Varianz 1. Die bei der *normal-score*-Transformation entstehenden Transformationstabellen wurden dazu eingesetzt, die generierten Daten der Simulationen zurück zu transformieren, um die tatsächlichen Histogramme und Wertebereiche der k_f -Werte zu erhalten.

SUFIX3: Parameterkombinationen im Sinne von SUFIX wurden hier nicht gezogen. Im Sinne des MCM stellt aber die Auswahl einer begrenzten Anzahl von Simulationen eine Stichprobenauswahl aus der unendlich großen Gesamtheit aller möglichen Simulationen dar.

SUFIX4: Die Auswertung der Zielfunktion beschränkt sich hier auf die Auswahl derjenigen Simulationen, welche die gemessenen Wasserstände und Konzentrationen am besten wiedergeben. Ein lokales *updating*, z.B. durch Kombination der Bereiche mit geringen Fehlerspannen, ist bisher nicht möglich.

4.4.4 Propagationsspfad TG

Die Unsicherheit wurde hier entsprechend dem Propagationsspfad TG in der Fallstudie 1 verfolgt, d.h. die Heterogenitätsabbildungen erfolgten mit dem *Truncated Gauss*-Verfahren. Die k_f -Werte wurden in drei Indikatorintervalle eingeteilt und dann darauf basierend eine Variogrammberechnung vorgenommen. Die Indikatorschwellenwerte wurden abweichend von dem Vorgehen im Fall 1 *nicht* über eine Gleichverteilung als unsichere Größen, sondern es wurde für alle Simulationen der Mittelwert des jeweiligen Indikatorintervalls verwendet. Die Simulationen wurden mit den generierten k_f -Werten konditioniert. Der 'Träger' der Unsicherheit ist hier allein die Unsicherheit über die Interpolation zwischen den bekannten 'Messpunkten', an denen die k_f -Werte im Schritt SUFIX1A ermittelt wurden.

Die Umsetzung des SUFIX-Verfahrens sieht damit folgendermaßen aus:

SUFIX 1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte

SUFIX 1B: Einteilung der k_f -Werte in 3 Intervallklassen. Die Simulationen in SUFIX 2 basierten auf den jeweiligen Mittelwerten der Intervalle. Für jede Modellschicht musste außerdem der Anteil des jeweiligen Intervalls an der Summenhäufigkeit aller k_f -Werte angegeben werden (s. Tabelle 4-6).

Variogramm: Die Variogrammparameter für die nachfolgenden Simulationen wurden mit in Form der drei Indikatorwerte codierten k_f -Werten für jede Modellschicht getrennt ermittelt.

SUFIX 2: Es wurden 20 unkonditionierte und 20 mit den generierten k_f -Werten konditionierte Simulationen für jede der fünf Modellschichten erstellt (s. Abbildungen C-6 bis C-10).

SUFIX 3: Der Ablauf entspricht prinzipiell dem in der Fallstudie 1 (Abbildung 3-22 auf Seite 91) dargestellten Vorgehen.

SUFIX 4: Die Auswertung der Modellergebnisse im Hinblick auf das Erreichen eines festgelegten Gütewertes erlaubt hier Rückschlüsse auf die Simulationen, welche die gemessenen Wasserstände und Konzentrationen am besten wiedergeben.

Tabelle 4-6: Summenhäufigkeiten der Durchlässigkeiten, eingeteilt in Indikatorintervalle.

	k_f -Indikatorintervalle $[\ln(k_f)]$			Anteile der Intervalle an den Summenhäufigkeiten [-]		
	Intervall 1	Intervall 2	Intervall 3	Intervall 1	Intervall 2	Intervall 3
46-50m+NN	<-15	≥ -15 ; <-5.0	≥ -5.0	0.6	0.2	0.2
50-54m	<-15	≥ -15 ; <-5.0	≥ -5.0	0.12	0.33	0.55
54-58m	<-6.5	≥ -6.5 ; <-4.5	≥ -4.5	0.2	0.2	0.6
58-62m	<-6.5	≥ -6.5 ; <-4.5	≥ -4.5	0.28	0.47	0.25
62-66m	<-8.0	≥ -8.0 ; <-5.0	≥ -5.0	0.4	0.4	0.2

4.4.5 Propagationspfad SA

Es wurden für jede Modellschicht 20 Simulationen erstellt. Als Software wurde hierfür SISIMPDF (DEUTSCH & JOURNAL, 1992) eingesetzt. Die so generierten Heterogenitätsabbildungen wurden dann modifiziert, indem das *Simulated Annealing* (SA)-Verfahren als Postprozessor angewendet wurde. Diese Verfahrensweise erschien sinnvoll, da vorangegangene Berechnungen auf der Grundlage der *Sequential Indicator* Simulationen allein keine befriedigende Ergebnisse erbrachten, andererseits jedoch eine konditionierte Grobabgrenzung der maßgebenden Durchlässigkeitsbereiche dadurch vorhanden war. Das SA-Verfahren 'verfeinert' diese Verteilungen unter Zuhilfenahme einer geeigneten Zielfunktion und eines sog. *training image*. In diesem *training image* können z.B. typische (deterministische) Großstrukturen, die mit stochastischen Simulationsverfahren nicht reproduziert werden können, vorgegeben werden.

Die SUFIX-Anwendung sieht wie nachstehend zusammengefasst aus:

SUFIX1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_f -Werte.

SUFIX1B: Es erfolgte eine Einteilung in Indikatorintervalle (s. Tabelle 4-7). Es wird keine statistische Verteilung der Werte innerhalb eines Intervalls eingeführt, d.h. für die nachfolgenden Berechnungen wurden die Intervall-Mittelwerte verwendet.

Variogramm: Für die Variogramme, die auf obiger Intervalleinteilung beruhen, ergaben sich Parameter, die für die Reichweiten recht gut mit dem aus dem gesamten *soft data*-Satz gefundenen Parameter übereinstimmen. Für *sill* und *nugget*-Effekt ergaben sich durch die Indikatortrans-

formation naturgemäß abweichende Werte (s. Tabelle 4-8). Es wurde auch hier das sphärische theoretische Modell für die Parameterbestimmung gewählt.

SUFIX 2: Ein Beispiel für die Ergebnisse nach dem SIS-Verfahren und der daran anschließenden Modifizierung mit dem SA-Verfahren zeigt Abbildung C-11.

SUFIX 3: Der Propagationspfad ist in Abbildung 4-30 dargestellt.

SUFIX 4: *Bayes' sequential updating* über die Anwendung einer Zielfunktion zur Ermittlung der besten Simulationen.

Tabelle 4-7: Indikatorintervalle für die Sequential Indicator-Simulationen

Intervall	1	2	3
$\ln(k_F)$	< -11	-11 bis -5	> -5
k_F [m/s]	< 1.67×10^{-5}	1.67×10^{-5} bis 6.75×10^{-3}	> 6.75×10^{-3}

Tabelle 4-8: Variogrammparameter für die Sequential Indicator Simulationen

	Reichweite (range) [m]	Anisotropie winkel [°]	Anteil an der Summenhäufigkeit [-]	nugget-Effekt
Intervall 1	2800	120	0.45	0.02
Intervall 2	600	120	0.25	0.02
Intervall 3	300	120	0.3	0.02

4.4.6 Propagationspfad MZ

Fall TEN5: Dieser Propagationspfad ist analog zu den entsprechenden Untersuchungen in der Fallstudie 1 angelegt. Auch hier wird eine manuelle Zonierung zur Abbildung der Heterogenität durchgeführt. Hierzu werden sämtliche *soft data* verwendet, so dass eine Tiefendifferenzierung durchgeführt werden kann. Die k_F -Verteilungen für die Modellschichten sind in den Abbildungen C-12 bis C-15 dargestellt. Die k_F -Werte wurden hierzu in vier Intervalle eingeteilt. Die Einteilung wurde so gewählt, dass die entstehenden Strukturen möglichst einfach und eindeutig abzugrenzen waren. Die absoluten Häufigkeiten spielten hierbei keine Rolle, so dass sich die Einteilung abweichend zu den Indikatorintervallen ergab.

Die SUFIX-Anwendung sieht damit folgendermaßen aus:

SUFIX 1A: Transfer der Bohrbeschreibungen in k_F -Werte.

SUFIX 1B: Die *soft data*- k_F -Werte wurden in vier Intervalle eingeteilt, die für alle fünf Modellschichten gültig waren.

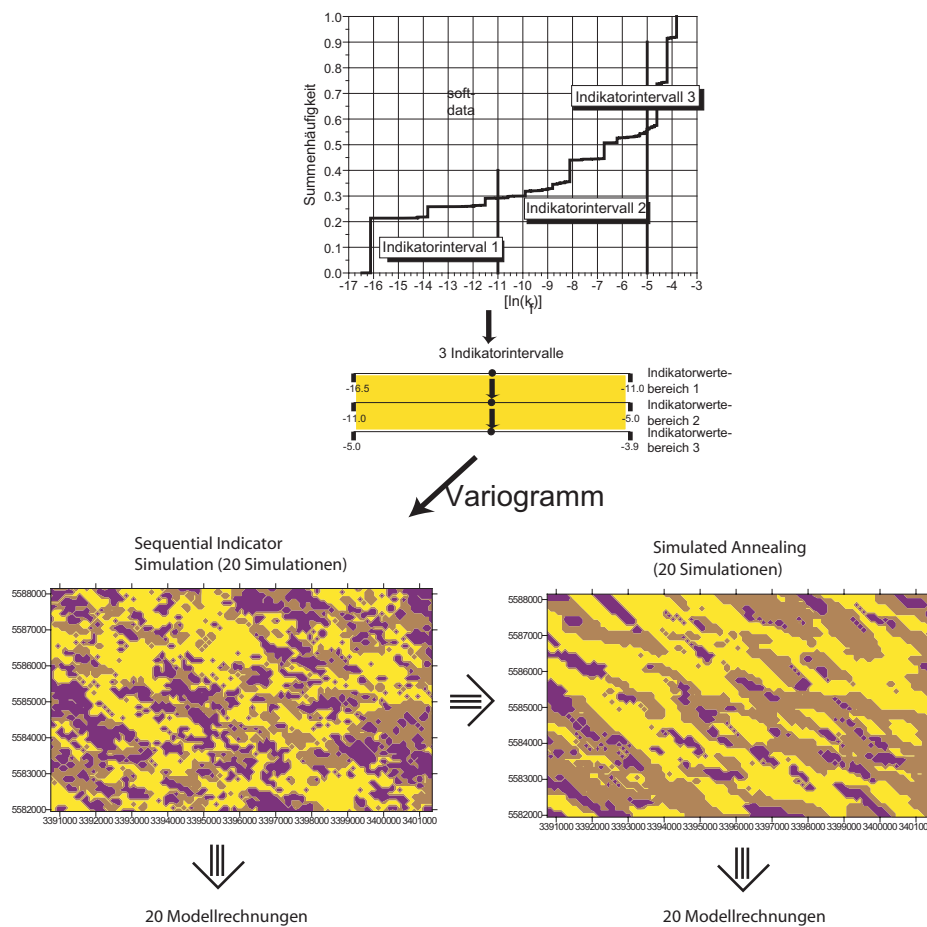


Abbildung 4-30: SIS und SA im Propagationspfad (SUFIX 3)

Variogramm: Hier nicht notwendig, da keine stochastischen Simulationen durchgeführt werden.

SUFIX 2: Heterogenitätsabbildung durch manuelle Zonierung.

SUFIX 3: Der Propagationspfad der Unsicherheiten entspricht exakt dem im Beispielfall1 beschriebenen Vorgehen.

SUFIX 4: *Bayes' sequential updating* über die Anwendung einer Zielfunktion.

Der Ablauf insgesamt entspricht exakt dem in der Fallstudie 1 dargestellten Schema (s. Abbildung 3-25), lediglich die Grenzen der Indikatorintervalle sind abweichend. Jedes der 4 Intervalle ist ebenfalls in 4 Klassen eingeteilt, wobei auch hier eine gleichförmige statistische Verteilung angenommen wird. Für eine vollständige Berechnung aller Parameterkombinationen wären demnach $4^4 = 256$ Modellrechnungen notwendig.

4.4.7 Deterministische Vergleichsrechnungen

Genau wie in der Fallstudie 1 wurden zu Vergleichszwecken Modellkonzeptionen ohne Einbeziehung von stochastischen Komponenten untersucht.

Fall TEN1: Hier wurde das einfachste hydrogeologische Modell eingesetzt, indem lediglich eine einschichtige Modellkonzeption gewählt und die Zonierung der Bereiche gleicher k_f -Werte relativ grob durchgeführt wurde.

Fall TEN2: Zum Vergleich mit dem Fall TEN1 sollte hier die Auswirkung einer eher unplausiblen Parameterverteilung ermittelt werden.

Fall TEN3: Das hydrogeologische Modell ist hier wesentlich komplexer, da es mehrschichtig unter Einbeziehung der k_f -Werte des gesamten *soft data*-Bestandes konzipiert ist.

4.5 Ergebnisse und Bewertung

In den Fällen, in denen das SUFIX-Verfahren eingesetzt wurde, erfolgt die Bewertung der Güte von Modellergebnissen über den Vergleich mit Messwerten. Dies sind für die Strömungsberechnungen die Grundwasserstände an 14 Messstellen, die über den Zeitraum 4.6.1984 bis 1.4.1986 gemittelt wurden. Für die Bewertung der Transportmodellierung dienten die Konzentrationsmessungen über den gleichen Zeitraum an insgesamt 61 Messstellen. Da in diesem Zeitraum nur zwischen 2 und 4 Messungen der Tri-Gehalte vorliegen, wurde auf die Ergebnisauswertung in Form von zeitabhängigen Zielfunktionen in diesem Beispielfall verzichtet. Die Erkenntnisse für ein *Bayes' sequential updating* beruhen hier also auf einzelnen zeitpunktbezogenen Zielfunktionen.

4.5.1 Stochastische Simulationen - kontinuierliche Heterogenität

Propagationspfad TB - Strömungsberechnungen

Die Güte der Strömungsberechnungen zeigt Abbildung 4-31 als Häufigkeitsverteilung der RMSE. Durch die Konditionierung der stochastischen Simulationen kann im Mittel eine deutliche Verbesserung der Modellergebnisse erreicht werden. Speziell die drastische Verringerung der Varianz ist auffallend und zeigt deutlich den Effekt einer Vereinheitlichung der Simulationen infolge der Konditionierung. Bedingt durch den vorzeitigen Abbruch einiger Modellrechnungen, infolge von Konvergenzproblemen beträgt die Anzahl der auswertbaren Modellrechnungen weniger als zwanzig.

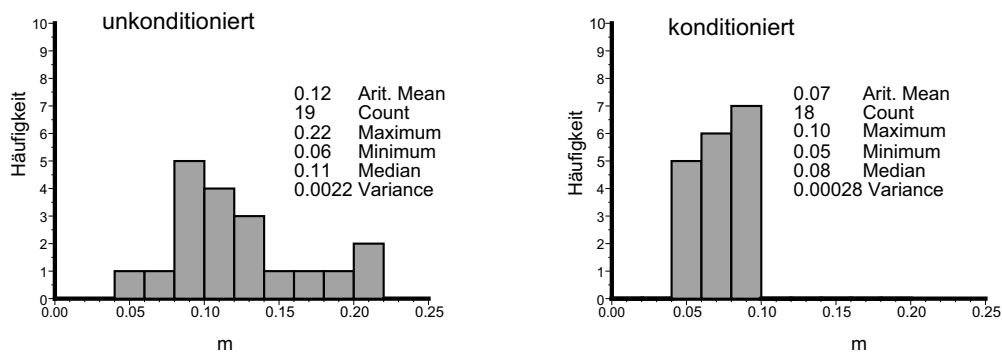


Abbildung 4-31: Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Strömung) - links und Fall TBC (Strömung) - rechts, ZF-Typ: -ID

Propagationspfad TB - Transportberechnungen:

Wegen der vorstehend erwähnten Problematik der geringen Anzahl von Werten in der Zeitreihe wird bei der Auswertung der Transportberechnungen nur die RMSE-Werte als Abweichung der Konzentrationen zum Zeitpunkt 1.4.1986 verwendet (s. Abbildung 4-32). Da nicht alle Probenahmen an einem Tag durchgeführt werden konnten, werden auch die Analysen maximal 3 Tage vor und nach diesem Stichtag berücksichtigt.

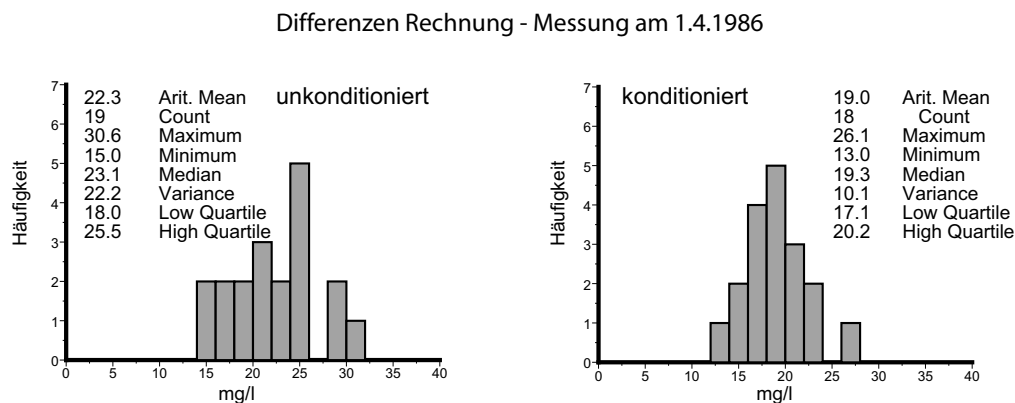


Abbildung 4-32: Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall TB (Transport) - links und Fall TBC (Transport) - rechts, ZF-Typ: DID

Auch für die Transportberechnungen zeigt sich eine Verbesserung der Übereinstimmung mit den Messwerten infolge der Konditionierung. Auch eine Verringerung der Varianz ist zu erkennen, jedoch fallen beide Effekte weniger stark aus als in den Strömungsberechnungen. Differenziert man die Residuen (Rechnung - Mes-

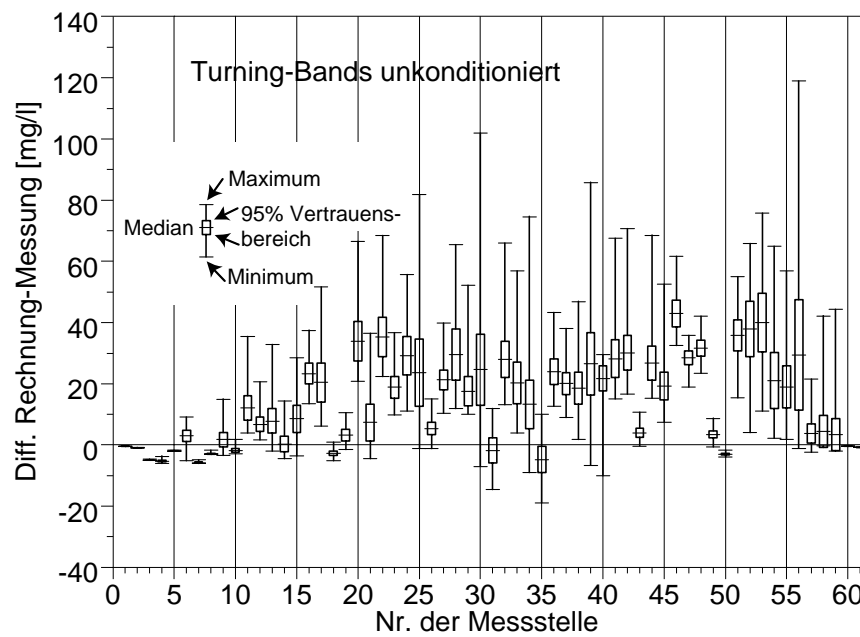


Abbildung 4-33: Propagationspfad TB (unkonditionierte Simulationen): Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messtellen. ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16

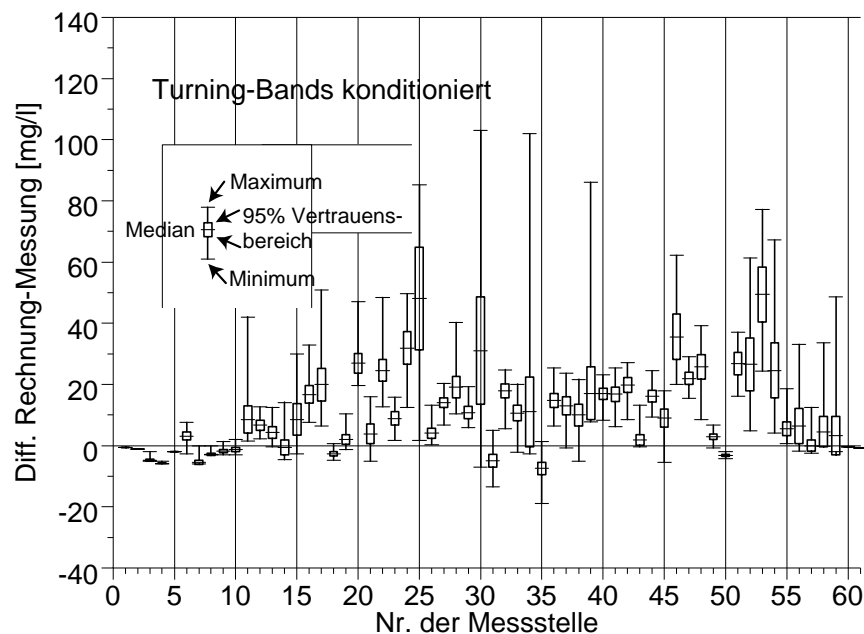


Abbildung 4-34: Propagationspfad TBC (konditionierte Simulationen): Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messtellen. ZF-Typ: DDI.

sung) nach den einzelnen Messtellen, ist deutlich zu erkennen, dass sowohl im konditionierten als auch im unkonditionierten Fall die Konzentrationen am 1.4.1986 meistens zu hoch berechnet werden (s. Abbildungen 4-33 und 4-34). Dieser systematischer Fehler kann auf eine Schwachstelle des hydrogeologischen Modells, wie z.B. dem nicht bekannten Abbau der gelösten Stoffe, hinweisen. Gleichmaßen können jedoch auch die Messwerte einen erheblichen Fehler aufweisen.

4.5.2 Stochastische Simulationen - diskrete Heterogenität

Propagationspfad TG - Strömungsberechnungen:

Die Güte der Strömungsberechnungen mit dem Truncated Gauss-Verfahren zeigt die Abbildung 4-35 (links) als Häufigkeitsverteilung der RMSE. Gegenüber

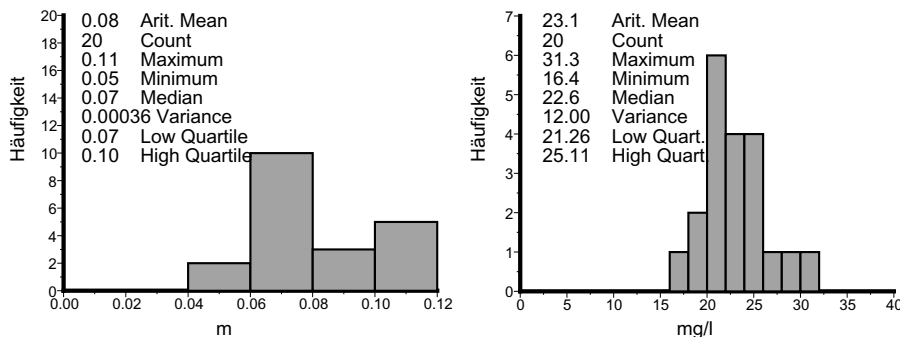


Abbildung 4-35: Häufigkeiten der RMSE, Fall TG, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID.

den Fällen TB und TBC ist eine deutliche bzw. leichte Verbesserung der Güte der Modellergebnisse festzustellen.

Propagationspfad TG - Transportberechnungen:

Die Auswertung als RMSE ist in Abbildung 4-35 (rechts) dargestellt. Die Güte der Modellrechnungen liegt etwa auf dem Niveau der Fälle TB und TBC. Der Vergleich der Messungen mit den Modellergebnissen zum Zeitpunkt 1.4.86, differenziert nach den einzelnen Messstellen, ist in Abbildung 4-36 dargestellt. Auch hier zeigt sich der gleiche Effekt wie in den Berechnungen der Fälle TB und TBC, dass nämlich die Modellergebnisse die Konzentrationen systematisch überschätzen. Die räumliche Verteilung des Variationskoeffizienten zeigt Abbildung C-16. Der Variationskoeffizient ist keine Zielfunktion, zeigt aber im Vergleich der Ergebnisse mit verschiedenen Ansätzen, inwieweit systematische Eigenheiten der Methoden vorhanden sind. Desweiteren ist die Auswirkung der Konditionierung erkennbar, da an den Bohrpunkten (deren k_f -Werte zur Konditionierung dienen) die Variation der Ergebnisse kleiner ist, als in anderen Bereichen.

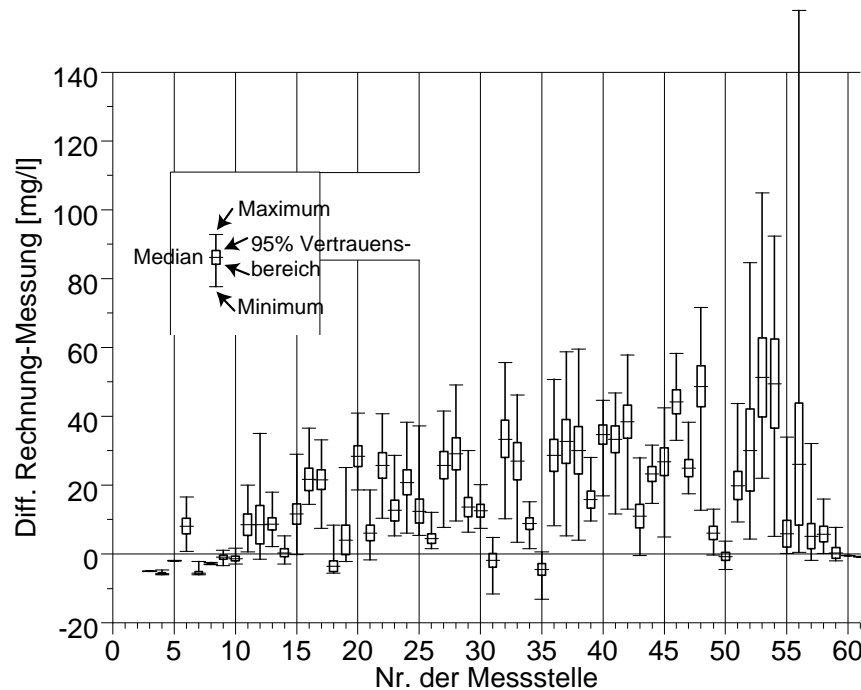


Abbildung 4-36: Propagationspfad TG: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen. ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16

Propagationspfad SA - Strömungsberechnungen:

Die Güte der Strömungsberechnungen liegt etwa auf dem Niveau der unkonditionierten *Turning Bands* Ergebnisse (Fall TB) (s. Abbildung 4-37, links)

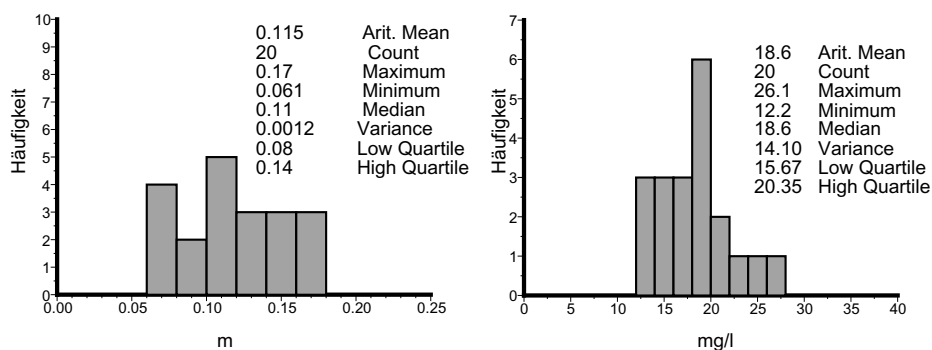


Abbildung 4-37: Absolute Häufigkeiten der RMSE, Fall SA, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID.

Propagationspfad SA - Transportberechnungen:

Die statistische Auswertung der Residuen als RMSE zeigt Abbildung 4-37 (rechts). Die Güte der Modellrechnungen ist vergleichbar mit der im Propagationspfad TBC ermittelten Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung. Die Darstellung der Residuen am Endzeitpunkt der Berechnung (s. Abbildung 4-38) zeigt ein ähnliches Bild mit einer systematischen Abweichung wie in den vorhergehenden Auswertungen. Die flächige Auswertung des Variationskoeffizienten in Abbildung C-17 zeigt im Vergleich mit Abbildung C-16 (Fall TG) ebenfalls qualitativ eine deutliche Übereinstimmung, was die Annahme eines systematischen Defizits im hydrogeologischen Modell unterstützt..

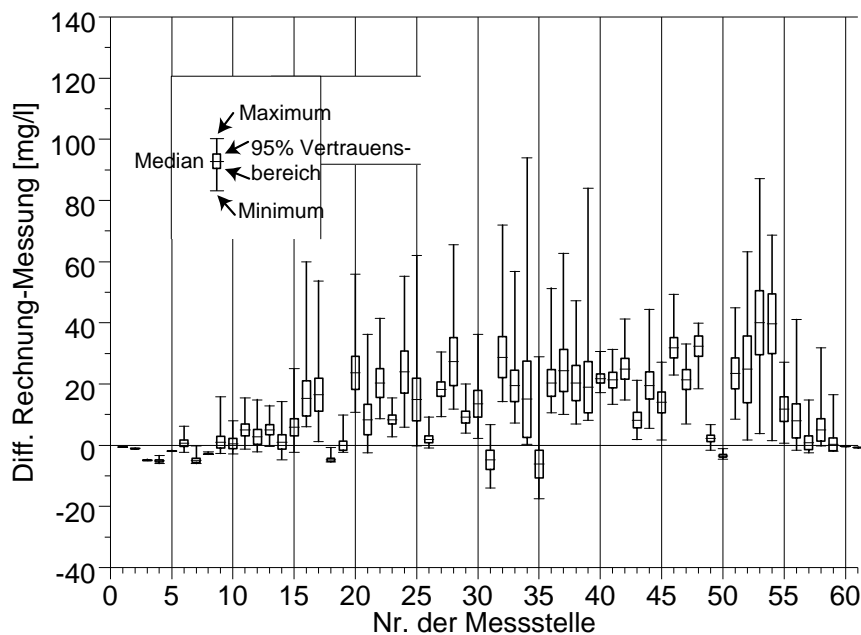


Abbildung 4-38: Propagationspfad SA: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DDI). Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16).

Propagationspfad MZ - Strömungsberechnungen:

In diesem Fall trat die Besonderheit auf, dass in den Ergebnissen der RMSE (s. Abbildung 4-39, links) in einigen Rechnungen deutliche Konvergenzfehler auftraten, die aber nicht zu einem Rechnungsabbruch führten. Bei einer automatisierten Kalibrierung kann dies zu einer Verfälschung der Ergebnisse führen. Vernachlässigt man diese Modellrechnungen zeigen die verbleibenden Ergebnisse eine relativ gute Übereinstimmung mit den Messdaten.

Transportberechnungen: Trotz in der Strömungsberechnung erkennbarer Konvergenzfehler, die v.a. in der Nähe von Entnahmen auftraten, zeigte die Transportberechnung auf der Grundlage aller Strömungsfelder nur eine sehr kleine Varianz (s. Abbildung 4-39, rechts). Daraus kann geschlossen werden, dass die

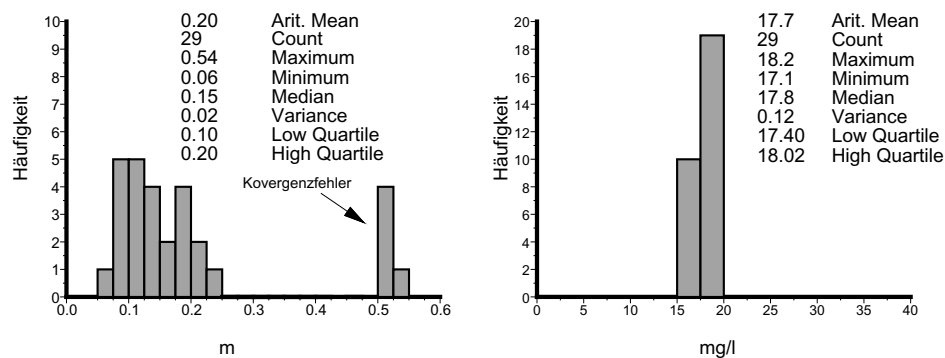


Abbildung 4-39: Häufigkeiten der RMSE, Fall MZ, Strömung (links) und Transport (rechts), ZF-Typ: -ID bzw. DID

kritischen Brunnenknoten weit genug von den Messpunkten für die Konzentrationen entfernt liegen, so dass sich Fehler im Strömungsfeld in den Transportberechnungen nicht verfälschend bemerkbar machen. Die geringe Varianz der Ergebnisse spiegelt sich auch in der Einzelauswertung der Messstellen wieder (s. Abbildung 4-40). Die

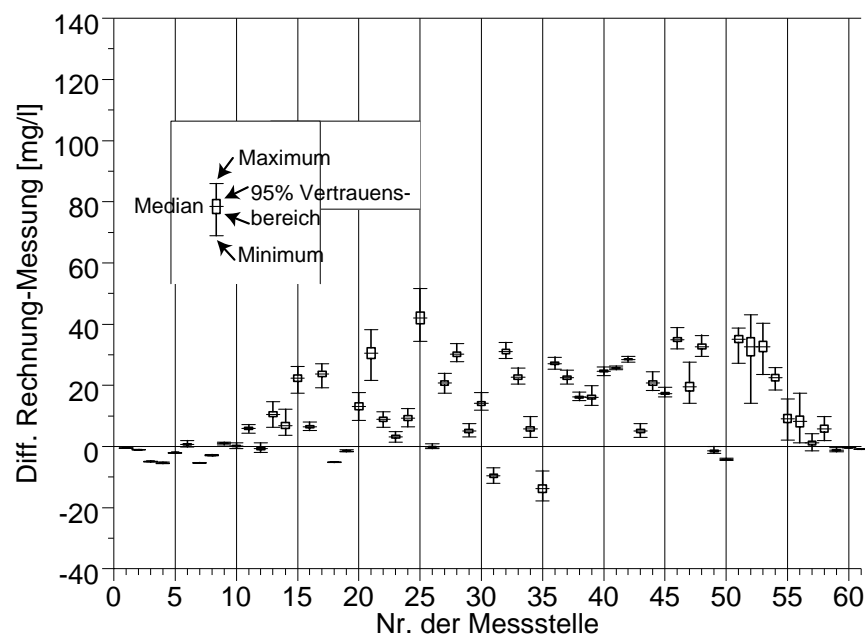


Abbildung 4-40: Propagationspfad MZ: Statistische Auswertung der Residuen der Transportberechnungen (am Endzeitpunkt) differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DDI. Zur Zuordnung der Nummern s. Tabelle A-16).

nicht variierte Zonen-Struktur hat also einen wesentlich höheren Einfluss als die Variation der zugewiesenen k_f -Werte.

4.5.3 Deterministische Vergleichsrechnungen

Für die Beurteilung der Ergebnisgüte der deterministischen Vergleichsrechnungen wurden für die Strömungsberechnungen die Differenzen zwischen stationärer Rechnung und den Messungen gebildet, während die Transportberechnungen am Endzeitpunkt mit den Messungen verglichen und ebenfalls räumlich gemittelt wurden. Tabelle 4-9 zeigt, dass die Güte der Ergebnisse in den drei Fällen TEN1, TEN2 und TEN3 relativ einheitlich ist. Auch hier zeigt sich, dass der Einfluss des sehr einfachen einschichtigen hydrogeologischen Modells auf die Ergebnisse sehr gering ist. Erst wenn das konzeptionelle Modell so geändert wird, dass ein Abbau des betrachteten Stoffes angenommen wird, tritt wie zu erwarten eine deutliche Verbesserung der Transportergebnisse ein. Neuere Laboruntersuchungen unterstützen die Annahme einer schrittweisen mikrobiellen Dehalogenierung von CKW's in Lockergesteinsaquiferen, so dass eine Modifikation des konzeptionelle Modells nach derzeitigem Kenntnisstand in Betracht zu ziehen ist (z.B. TOUSSAINT, 1994). Hierzu müsste dann allerdings durch entsprechende Laboruntersuchungen eine Eingrenzung der *a priori* Annahmen für die Unsicherheitsanalyse durchgeführt werden.

Um einen Vergleich mit den entsprechenden räumlich differenzierten Auswertungen der anderen Fälle vornehmen zu können, wurde hier, wie in Abbildung 4-41 gezeigt, die Differenz zwischen Rechnung und Messung für die Transportuntersuchungen messstellendifferenziert aufgetragen. Zu erkennen ist, dass die Abweichungen zu den Messungen tendenziell sehr ähnlich denen der Berechnungen mit stochastischer Komponente sind. So zeigen auch die deterministischen Modellergebnisse nur an wenigen Messstellen eine negative Abweichung zu den Messungen. An einzelnen Messstellen ist jedoch auch der positive Einfluss des mehrschichtigen hydrogeologischen Modells (TEN3) mit tendenziell geringeren Abweichungen zu den Messungen zu erkennen.

Tabelle 4-9: Auswertung der Residuen für die deterministischen Vergleichsrechnungen (ZF-Typ: -I- für die Strömungsberechnung bzw. DI- für die Transportberechnung)

TEN1		TEN2		TEN3		
RMSE - Strömung [m]	RMSE - Transport [mg/l]	RMSE - Strömung [m]	RMSE - Transport [mg/l]	RMSE - Strömung [m]	RMSE - Transport [mg/l]	Abbaukonstante [1/s]
0.08	20.5	0.08	20.2	0.09	19.5	ohne Abbau
				- " -	13.7	$5 \cdot 10^{-9}$
				- " -	9.6	$1 \cdot 10^{-8}$
				- " -	5.5	$5 \cdot 10^{-8}$
				- " -	6.4	$1 \cdot 10^{-7}$

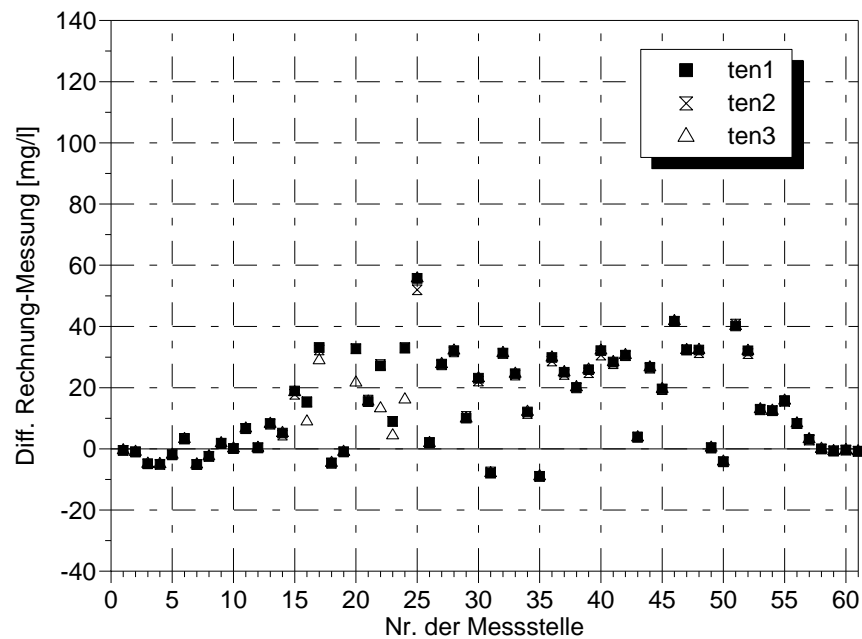


Abbildung 4-41: Residuen (Rechnung-Messung, Endzeitpunkt) der deterministischen Vergleichsrechnungen differenziert nach Messstellen (ZF-Typ: DD-)

4.6 Zusammenfassung

Die Fallstudie 2 zeigt die Anwendung des SUFIX Verfahrens auf einer größer-räumigen Anwendungsskala. Für das untersuchte Industriegebiet lagen 351 Bohrprofilbeschreibungen vor, die für die *soft data* Generierung eingesetzt werden konnten. Das Gebiet kann als insgesamt relativ homogen im Untergrundaufbau und als sehr durchlässiger Aquifer angesehen werden.

Für den Aufbau des hydrogeologischen Modells konnte zusätzlich auf die Analysenergebnisse verschiedener CKWs, die im Rahmen einer Sanierungsmaßnahme gewonnen wurden, zurückgegriffen werden. Diese Werte dienten auch zur Gütebewertung der verschiedenen Propagationspfade. Anhand der Variogrammauswertung konnten deutliche korrelierte tiefen- und richtungsabhängige Strukturen identifiziert werden. Hierauf basierend erschien trotz der Homogenität des Aquifers eine vertikale Diskretisierung des numerischen Modells in 5 Schichten als gerechtfertigt.

Die untersuchten Propagationspfade stimmten weitgehend mit denen überein, die auch schon in der Fallstudie 1 verwendet wurden. In sämtlichen Ergebnissen fiel auf, dass sich die Residuen an vielen Messstellen in der relativen räumlichen Lage ihrer Maxima und Minima weitgehend unabhängig von den gewählten Methoden der Heterogenitätsabbildung verhalten. Das Erkennen dieses systematischen Fehlers zeigt, dass SUFIX, neben der Quantifizierung der Modellunsicherheiten, auch dazu geeignet ist, fehlende Kenntnisse über Prozesse, die das Transportverhalten der

Wasserinhaltsstoffe prägen, in dem gewählten hydrogeologischen Modell sichtbar zu machen.

5

Bewertung der eingesetzten Verfahren

In diesem Kapitel soll eine Bewertung der eingesetzten Verfahren hinsichtlich ihrer praktischen Verwendbarkeit erfolgen. Als Verfahren werden einmal SUFIX als übergeordnetes Steuer-Verfahren, das untergeordnete Verfahren zusammenführt, sowie die Verfahren zur stochastischen Simulation der Heterogenität in den Durchlässigkeitsverteilungen und auch das *Bayes'sche updating*-Verfahren zur Optimierung dieser Verteilungen angesehen. Eine Bewertung der anderen eingesetzten Bausteine soll nachstehend nur sehr kurzgefasst erfolgen, da diese als Standardverfahren angesehen werden können:

SUFIX 1A (Datenaufbereitung, speziell von *soft data*): Es zeigte sich in den Untersuchungen, dass SUFIX geeignet ist, jedes beliebige Verfahren zur Generierung von modellrelevanten Informationen zu integrieren. Dadurch, dass den Daten im folgenden Verfahrensschritt beliebige Unsicherheitsverteilungen zugewiesen werden können, ist hier eine größtmögliche Flexibilität gegeben.

SUFIX 1B (Zuweisung von *a priori*-Unsicherheitsverteilungen): Die Untersuchungen haben die Annahme bestätigt, dass die Wahl der *a priori*-Verteilung für unsichere Daten innerhalb des *Bayes'schen updating*-Prozesses sich auf das Ergebnis der Optimierung auswirkt. Da die subjektive Einschätzung des Bearbeiters hier von Bedeutung ist, muss diesem Aspekt bei der praktischen Anwendung besondere Beachtung geschenkt werden. Dies ist als Nachteil des *Bayes'schen sequential updating*-Verfahrens (Schritt SUFIX 4) gegenüber den sonstigen inversen Optimierungsverfahren anzusehen.

Variographie: Das an die Messdaten angepasste Variogramm als statistisches Strukturmodell des Untergrundes gibt über die Ermittlung statistischer Kennziffern Anhaltspunkte über die Größe und räumliche Orientierung von Untergrundstrukturen. Reproduzierte geostatistische Parameter unterliegen Skaleneinflüsse, vor allem ist der typische Abstand der Bohrungen maßgebend.

SUFIX 3 (Stichprobenauswahl der Parameterkombinationen): Hier sind beliebige Stichproben-Verfahren, wie z.B. *Latin-Hypercube sampling* (stratifizierte Probenahme), einsetzbar. Die praktische Anwendbarkeit des Verfahrens hängt eng mit der gewählten Anzahl der Parameterkombinationen zusammen.

5.1 Eignung des SUFIX-Verfahrens für den praktischen Einsatz bei der Grundwasser- modellierung

5.1.1 Bewertung der Verfahren zur Abbildung der Heterogenität anhand einer integralen Zielfunktion

SUFIX ist ein konzeptionell einfaches Verfahren, das es erlaubt beliebige Verfahren zur Abbildung der Heterogenität des Untergrundes zu integrieren. Werden diese Abbildungen nach geostatistischen Konzepten systematisch variiert, ist eine Quantifizierung der Modellunsicherheiten, die aus den Unzulänglichkeiten der i.d.R. nur punktuell ermittelten Untergrundstruktur herrührt möglich.

Zur Beurteilung der Güte eines Verfahrens im Hinblick auf die möglichst getreue Wiedergabe von Messwerten ist der Zielfunktionstyp **III** am besten geeignet, da er **einen** integralen Vergleichswert liefert. In den Anwendungsfällen wurden für die Ergebnisse jedes Propagationspfades ein Gütewert als Mittel über die Zeit, den Ort und, wenn vorhanden, über alle Simulationen gebildet. Da im Anwendungsfall 2 nur ein Stichtag zum Vergleich von Modellergebnissen und Messungen verfügbar war, wurde in diesem Fall der Zielfunktionstyp **DII** eingesetzt, d.h. über die Zeit wird hier nicht gemittelt, sondern die Auswertung erfasst nur einen spezifizierten Zeitpunkt. Zusätzlich wurde in den Fällen, in denen eine stochastische Komponente integriert war, das Mittel über die besten 25% der Ergebnisse gebildet. Die den Ergebnissen der stochastischen Simulationen in diesem sog. *low quartil* zugeordneten Parametersätze könnten dann als Ausgangswerte für Prognoserechnungen eingesetzt werden.

Die Ergebnisse sind in den Tabellen 5-1 bis 5-4 zusammengefasst und sollen nachfolgend bezogen auf die Verfahren der Heterogenitätsabbildung näher erläutert werden.

Tabelle 5-1: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 1.

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ III [mg/l]	Rang-Nr. aus Transportrechnung	RMSE ZF-Typ -II Flach -Tief [m]	Rang-Nr. aus Strömungsrechnung	soft data Integration	Stochastische Komponente	
		Transport		Strömung				
MZ	MZ	1,04	1	0,13	0,30	2	ja	ja
TG	TG	1,11	2	0,36	0,51	8	ja	ja
Vergl.	TAE4	1,24	3	0,23	0,36	5	ja	nein
TB	TBC	1,31	4	0,24	0,39	6	ja	ja

Tabelle 5-1: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 1.(Forts.)

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ III [mg/l]	Rang-Nr. aus Transport-rechnung	RMSE ZF-Typ -II Flach -Tief [m]	Rang-Nr. aus Strömungs-rechnung	soft data Integra-tion	Stochas-tische Kompo-nente
Vergl.	TAE2	1,35	5	0,23 0,36	3	nein	nein
Vergl.	TAE1	1,36	6	0,13 0,27	1	nein	nein
COK.	COK	1,39	7	0,22 0,38	4	ja	nein
SA	SA	1,42	8	0,36 0,37	7	ja	ja

Tabelle 5-2: Ranking der Methoden nach low-Quartil (die 25% besten Ergebnisse, Fallstudie 1)

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ III [mg/l]	Rang-Nr. aus Transport-rechnung	RMSE ZF-Typ -II Flach -Tief [m]	Rang-Nr. aus Strömungs-rechnung	soft data Integra-tion	Stochas-tische Kompo-nente
			Transport		Strömung		
MZ	MZ	0,85	1	0,09 0,25	1	ja	ja
TG	TG	0,93	2	0,33 0,48	8	ja	ja
TB	TBC	1,12	3	0,22 0,38	4	ja	ja
Vergl.	TAE4	(1,24) ^a	4	(0,23) (0,36)	6	ja	nein
SA	SA	1,24	4	0,24 0,27	7	ja	ja
Vergl.	TAE2	(1,35)	6	(0,21) (0,36)	3	nein	nein
Vergl.	TAE1	(1,36)	7	(0,13) (0,27)	2	nein	nein
COK.	COK	(1,39)	8	(0,22) (0,38)	4	ja	nein

a. (1,24): nur 1 Modellrechnung, da keine stochastische Komponente integriert

Tabelle 5-3: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 2 (Güte der Ergebnisse am Stichtag 1.4.1986)

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ DII [mg/l]	Rang-Nr. aus Transport-rechnung	RMSE ZF-Typ -II [m]	Rang-Nr. aus Strömungs-rechnung	soft data Integra-tion	Stochas-tische Kompo-nente
			Transport		Strömung		
MZ	MZ	17,7	1	0,14 ^a	8	ja	ja
SA	ANV3	18,6	2	0,12	4	ja	ja
TB	TBC	19,0	3	0,07	1	ja	ja

Tabelle 5-3: Ranking der Methoden aufgrund der Transport- und Strömungsberechnungen in der Fallstudie 2 (Güte der Ergebnisse am Stichtag 1.4.1986)(Forts.)

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ DII [mg/l]	Rang-Nr. aus Transport-rechnung	RMSE ZF-Typ -II [m]	Rang-Nr. aus Strömungs-rechnung	soft data Integration	Stochastische Komponente
Vergl.	TEN3	19,5	4	0,09	6	ja	nein
Vergl.	TEN2	20,2	5	0,08	2	nein	nein
Vergl.	TEN1	20,5	6	0,08	2	nein	nein
TB.	TB	22,3	7	0,12	7	ja	ja
TG.	TG	23,1	8	0,08	2	ja	ja

a. ohne Ausreisser durch Konvergenzfehler.

Tabelle 5-4: Ranking der Methoden nach low-Quartil (die 25% besten Ergebnisse, Fallstudie 2)

Propagationspfad	Fall	RMSE ZF-Typ DII [mg/l]	Rang-Nr. aus Transport-rechnung	RMSE ZF-Typ -II [m]	Rang-Nr. aus Strömungs-rechnung	soft data Integration	Stochastische Komponente
		Transport		Strömung			
SA	ANV3	14,1	1	0,07	3	ja	ja
TB	TBC	15,4	2	0,03	1	ja	ja
TB	TB	16,2	3	0,07	3	ja	ja
MZ	MZ	17,3	4	0,08 ^a	5	ja	ja
TG	TG	19,3	5	0,06	2	ja	ja
Vergl.	TEN3	(19,5)	6	(0,09)	8	ja	nein
Vergl.	TEN2	(20,2)	7	(0,08)	5	nein	nein
Vergl.	TEN1	(20,5)	8	(0,08)	5	nein	nein

a. ohne Ausreisser durch Konvergenzfehler.

Turning-Bands (Fälle TB, TBC): Die Modellergebnisse auf der Grundlage der konditionierten Turning-Bands Simulationen liegen in der Fallstudie 1 im Mittelfeld aller Verfahren und bei alleiniger Betrachtung der stochastischen Verfahren am Ende der Ranking-Tabelle. Nimmt man alle Ergebnisse in die Auswertung liegen die Ergebnisse sogar hinter denen, die mit dem sehr einfachen, einschichtigen, manuell zonierten Ansatz erreicht werden. In der Fallstudie 2, die eher großskalig homogene Verhältnisse repräsentiert, liegen die Ergebnisse der Methode wesentlich besser, vor allem wenn nur die 25% besten Ergebnisse betrachtet werden.

Truncated Gauss (Fall TG): Diese Methode zeigt die besten Ergebnisse im kleinskalig heterogenen Fall 1, wo Rang 2 erreicht wurde. Im Gegenzug ist in der Fallstudie 2 dies das schlechteste aller Verfahren, die eine stochastische Komponente besitzen. Besonders bei dieser Methode ist die Diskrepanz zwischen dem Ergebnis für die Stofftransportberechnungen und demjenigen für die Strömungsberechnungen auffällig. Selbst bei Betrachtung der 25% besten Ergebnisse gibt das Truncated Gauss Verfahren im Fall 1 die Grundwasserstände deutlich schlechter wieder als alle anderen Verfahren. Im Fall 2 tritt der gegenteilige Effekt auf, hier ist das Ranking aufgrund der Strömungsergebnisse deutlich besser als im Fall der Transportberechnungen.

Simulated Annealing (Fall SA): Die deutlichste Abhängigkeit von den spezifischen Bedingungen der Anwendungsfälle zeigte das *Simulated Annealing* Verfahren. Während hiermit im Fall 2 bei relativ großskaligen Strukturen sehr gute Ergebnisse vor allem bei der Transportmodellierung erzielt werden konnten (Rang 1 bei den 25% besten Ergebnissen), erscheint es für kleinskalig strukturierte Gebiete nur schlecht geeignet zu sein (letzter Rang bei der Verwendung sämtlicher Ergebnisse). Ein wichtiger Grund für dieses Ergebnis ist sicherlich, dass für das Trainingsbild im Fall 2 umfassende hydrogeologische Kenntnisse über die wahrscheinlichsten Strukturen und ihre Orientierung einfließen konnten.

Manuelle Zonierung mit stochastischer Komponente (Fall MZ): Zieht man die Ergebnisse aller Modellrechnungen zur Auswertung heran, ergeben sich für dieses Verfahren in beiden Fallstudien die besten Ergebnisse (Tabellen 5-1 und 5-3). Lediglich bei der Betrachtung der 25% besten Ergebnisse in der Fallstudie 2 fällt es auf Rang 4 zurück. Hier wirkt sich aus, dass die Ergebnisse nur eine sehr geringe Varianz aufweisen, d.h. die Zuweisung der Werte zu den manuell zonierten Strukturen spielt in diesem relativ homogenen Untersuchungsgebiet eine stark untergeordnete Rolle gegenüber der Festlegung der Strukturen selbst.

Cokriging (Fall COK): Dieses Verfahren wurde nur in der Fallstudie 1 eingesetzt. Das Verfahren ist augenscheinlich nur schlecht in der Lage, die tatsächlichen Strukturen des Untergrundes in der einen generierten Verteilung abzubilden. Die großen Abweichungen zu den Messwerten bringen das Cokriging nur auf den vorletzten bzw. letzten Platz des Ranking.

Vergleichsrechnungen mit manueller Zonierung und ohne stochastische Komponente (Fall TAE4, TEN3):

Das hydrogeologische Modell stimmt in diesen Fällen mit dem im Propagationspfad MZ verwendeten überein, wobei jedoch für die k_f -Werte die Mittelwerte der Wertebereiche verwendet wurden. Es wurde also in den beiden Fallstudien jeweils nur eine Modellrechnung durchgeführt. Trotzdem zeigt diese Vorgehensweise, die bis auf die Einbeziehung der *soft data* dem traditionellen Modellierungsansatz entspricht, in beiden Fallstudien beachtlich gute Ergebnisse. So liegt z.B. bei den Transportberechnungen die Ergebnislage bei der Betrachtung sämtlicher Ergebnisse in beiden Fallstudien über der mit der Turning Bands Methode erreichten.

Manuelle Zonierung mit einfachem hydrogeologischen Modell (Fall TAE1,2 und TEN1,2):

Trotz der stark vereinfachenden Annahmen im einschichtigen hydrogeologischen Modell und der Nichteinbeziehung von *soft data* zeigt das traditionelle Verfahren zumindest bei der Betrachtung sämtlicher Ergebnisse eine akzeptable Güte (Tabellen 5-1 und 5-3).

Zusammenfassung: Es werden wie erwartet die besten Ergebnisse erzielt, wenn sowohl die abgeleiteten Daten aus der Bohrbeschreibung integriert werden als auch eine stochastische Komponente durch die Einführung verschiedener Realisationen der Heterogenitätsabbildung eingeführt wird. In beiden Fallstudien werden auf der Grundlage der Auswertung sämtlicher Modellergebnisse die besten Ergebnisse mit einer Kombination aus deterministischen und stochastischen Verfahren erzielt. Die Heterogenitätsabbildung erfolgt hierbei über eine manuelle Zonierung, und die zugehörigen Parameterwerte für jede Zone erfolgen über eine Stichprobenauswahl nach dem *Latin-Hypercube*-Verfahren.

Der Einsatz von stochastischen Simulationen zur Heterogenitätsabbildung wird vor allem bei der Modellierung von relativ homogenen Untersuchungsgebieten einen entscheidenden Vorteil bieten. In den Ergebnissen beider Fallstudien ist zu erkennen, dass die Güte der Ergebnisse der beschriebenen Fälle mit manueller Zonierung und Stichprobenzuweisung der Werte aus einer gleichförmigen Verteilung deutlich besser ist als in den sehr ähnlich gelagerten Fällen TAE4 bzw. TEN3 (Vergleichsrechnungen), in denen statt mit Stichprobenwerten lediglich mit den Mittelwerten dieser Verteilungen gerechnet wurde. Dieses Ergebnis liegt wohl u.a. in der relativ geringen Stichprobengröße begründet.

Soll die Unsicherheit der Modellergebnisse quantifiziert werden, ist man auf den Einsatz stochastischer Verfahren angewiesen. Der einfachste und in der Fallstudie 1 auch effektivste Weg ist der, das SUFIX-Verfahren, als erweiterte Monte Carlo Methode, einer manuellen Zonierung und eventuell einem *Bayes'schen Updating*-Prozess einzusetzen (Propagationspfad **MZ**). Ein ähnliches Ergebnis finden KEIDSER & ROSBJERG (1991), die ebenfalls die reine Zonierung ohne geostatistische Annahmen den anderen drei untersuchten Verfahren der inversen Parameterbestimmung als überlegen fanden, wenn die Datengrundlage nicht gut oder große Messfehler der Parameter vorhanden waren.

Zumindest in dieser Anwendung zeigt sich, dass eine manuelle Generierung dieser wichtigen Parameterfelder unter Zuhilfenahme entsprechenden Sachverständes und von Zusatzinformationen, einer rein globalen und nur statistischen Kennwerten unterworfenen Erstellung überlegen ist.

Als Ergebnis ist darüber hinaus wichtig, dass die Rang-Nummern, die sich aus der Strömungsmodellierung ergeben, nicht unbedingt mit der Einstufung bei der Transportmodellierung übereinstimmen müssen. Besonders deutlich wird dies beim Fall TG, der eine schlechte Nachbildung der Strömungsverhältnisse zeigt, dafür aber die Ergebnisse des Tracerversuchs sehr viel besser wiedergeben kann. Dies zeigt deutlich, dass die maßgebenden Strukturen zur Festlegung der Ausbreitungsvorgänge sich in der Regel von den Strukturen unterscheiden, die für Strömungsvorgänge im Untergrund relevant sind.

Eine Bewertung der Verfahren auf der Grundlage von zwei Anwendungsbeispielen, in denen die Stichprobengrößen aus der Gesamtheit der möglichen Realisationen der Heterogenitätsabbildungen relativ klein sind, kann durchaus kritisch betrachtet werden. Hinzu kommt, dass die Modellergebnisse zumindest in der Fallstudie 2 zeigen, dass entweder die Messwerte der Konzentrationen eine hohe Unsicherheit aufweisen oder/und wesentliche Prozesse des Transports im Untergrund nicht bekannt sind und nicht nachgebildet werden können (z.B. Abbau von CKWs in Lockergesteinsaquiferen).

Da es aber eine wesentliche Intention dieser Arbeit war, die Eignung stochastischer Methoden an realen Praxisfällen zu erproben, zeigt dieser Sachverhalt lediglich, dass hier noch ein deutlicher Mangel in der praktischen Umsetzung der Methoden liegt.

5.1.2 Eignung der Propagationspfade für das „Bayes'sche Updating“

In diesem Abschnitt soll beurteilt werden, wie das Ziel der Reduzierung von Unsicherheiten mittels des *Bayes'sche Updating* umgesetzt und in das SUFIX-Verfahren integriert werden konnte.

Im Idealfall sollten die Ergebnisse der stochastischen Modellierung um den Messwert streuen, um dann diejenigen Ergebnisse, die eine geringe Abweichung zeigen als beste Ergebnisse anhand eines Gütekriteriums einer Zielfunktion auswählen zu können. Bei den meisten Messstellen in der Fallstudie 2, zumindest für den Vergleich am gewählten Stichtag, trifft dies jedoch nicht zu. Man kann hier von einer systematischen Verzerrung der Ergebnisse sprechen, die nicht durch die gewählte stochastische Methode der Heterogenitätsabbildung sondern bereits in den Festlegungen des hydrogeologischen Modells begründet liegt. Anschaulich ist dies vielleicht mit dem Schrotschuss-Analogon zu verdeutlichen (s. Abbildung 5-1).

In den Fällen A und B soll eine systematische Abweichung der Modellergebnisse gegenüber den Messwerten vorliegen, die auf falschen Festlegungen im hydrogeologischen Modell beruhen kann. Dies können für Betrachtungen des Stofftransports insbesondere nicht berücksichtigte Prozesse, wie z.B. der Abbau eines Stoffes sein. Ebenso können jedoch auch systematische Messfehler in Analysen der Wasserinhaltsstoffe einen solchen Effekt hervorrufen (Fall E in der Abbildung).

Gegenüber dem Fall C, in dem ein adäquates hydrogeologisches Modell eingesetzt wird, die Streuung der Ergebnisse aber noch groß ist, wird im Fall D der Unsicherheitsbereich durch den Einsatz von SUFIX als Werkzeug zur Reduzierung der Modellparameter-Unsicherheiten deutlich verkleinert. Fall D stellt damit das anzustrebende Ergebnis einer Unsicherheitsanalyse dar.

Generelle Voraussetzung für den *updating*-Prozess ist die Ermittlung der *besten* Parameterkombinationen, d.h. die Identifizierung derjenigen Modellparameter, die gemessene Zustände in der Natur am besten wiedergeben können. Das SUFIX-Verfahren grenzt dabei die Spannweite der *a priori* angenommenen statistischen Unsicherheitsverteilungen so ein, dass mit einer möglichst geringen Anzahl an Modellrechnungen die verbleibende Unsicherheit in den Prognoserechnungen quantifiziert

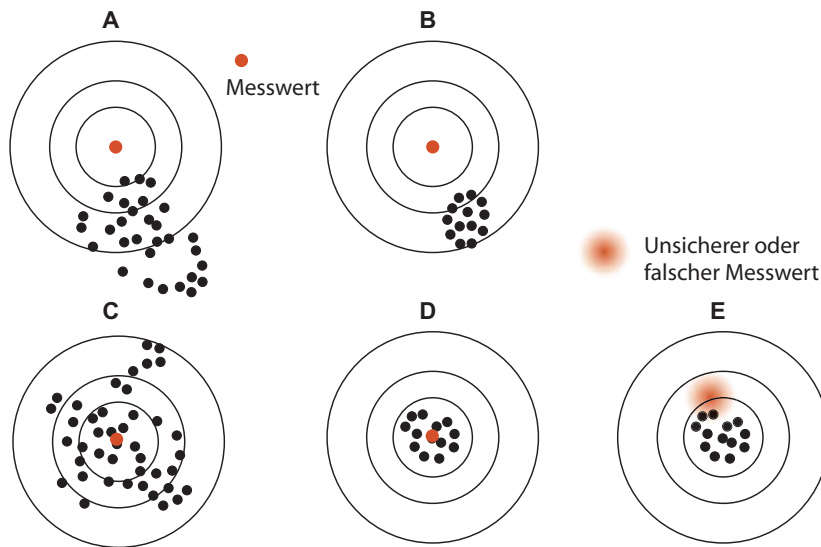


Abbildung 5-1: Analogie zwischen dem Ergebnis einer Unsicherheitsanalyse an einer Referenzmessstelle und einem Schrotschuss.

werden kann. Da sich die Randbedingungen (z.B. der Hydrologie) in den Prognosen sicher von den Bedingungen unterscheiden werden, die für die Unsicherheitsanalyse angenommen wurden, ist hierfür keine Reduzierung der Unsicherheiten in einer Vorabanalyse sinnvoll und möglich (s. Abbildung 5-2).

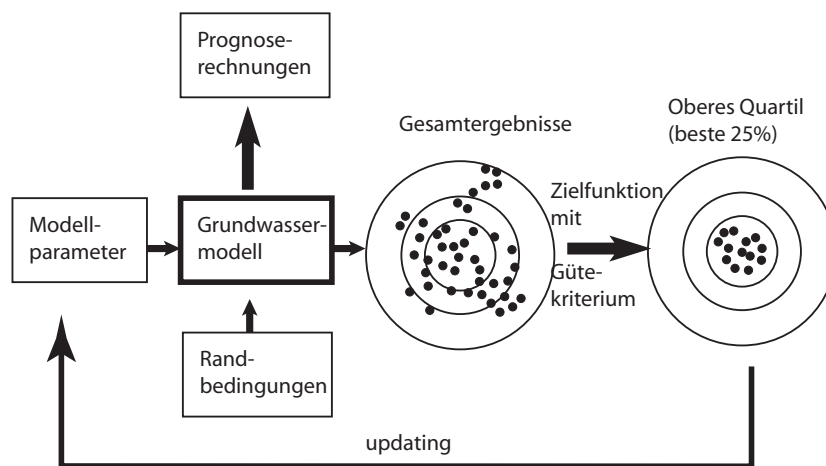


Abbildung 5-2: Der updating Prozess bei einem geeigneten hydrogeologischen Modell

Die für Prognoserechnungen am besten geeigneten Simulationen sind ermittelbar mit dem Kriterium **IID [Zeit, Ort, Simulation]** für die Transportrechnungen

bzw. **-ID** für die stationären Strömungsberechnungen. Das Kriterium liefert einen globalen, zeitlich gemittelten Fehler für jede Simulation.

Nachfolgend soll für jeden der in den Anwendungsfällen verwendeten Propagationspfade die Möglichkeiten des *Updating*, gleichbedeutend mit der Reduzierung der Eingangsdaten-Unsicherheiten, auf der Grundlage dieses Kriteriums beurteilt werden.

Propagationspfad TB

- A. Im ersten *updating*-Schritt entsprechend dem Ablauf in Abbildung 3-19 auf Seite 88 ist eine einfache Auswahl etwa nach dem *low Quartil* des RMSE möglich. Ein lokales *updating* der einzelnen Simulationen mit den Ergebnissen einer Zielfunktion **IDD** ist bisher noch nicht möglich. Ein lokales *updating* würde die Anzahl der zu generierenden Simulationen stark verringern, da prinzipiell jede Simulation dann für die Prognose verwendet werden könnte.
- B. Werden verschiedene Variogramme (Variogramm-Realisationen im geostatistischen Sinne) zur Generierung der Simulationen eingesetzt, können im nächsten *updating*-Schritt die Variogramm-Parameter ermittelt werden, die für die besten Simulationen verwendet wurden.
- C. Mit diesen Parametern kann dann auf die statistische Verteilung der Ausgangsdaten rückgeschlossen werden. Für jede Bohrung wird damit eine Einengung der *a priori*-Verteilung angestrebt.
- D. Im Hinblick auf die Bedingungen für den *Bayes'schen updating*-Prozess ist dieser Propagationspfad gut geeignet.

Propagationspfad TG

- A. Die stochastischen Simulationen selbst können bisher keinem lokalen *updating* unterzogen werden. Hier ist jedoch eine Trennung zwischen der Struktur-Generierung der Heterogenitätsabbildung und der Zuweisung der Parameterwerte durchführbar, da die Simulationen als Ergebnis die räumliche Verteilung der Indikatorwerte (Zahlen 1 bis n, bei n Indikatorwertebereichen) und nicht die der k_f -Werte selbst liefern. So wurden im Anwendungsfall 1 etwa 20 Simulationen erstellt, von denen jede mit 5 verschiedenen Parametersätzen 'gespeist' wurde, so dass insgesamt 100 Simulationen für die Modellrechnungen zur Verfügung standen.
- B. Ein *updating* der Indikatorwertebereiche ist im nächsten Schritt möglich. Die wahrscheinlichste räumliche Struktur ist mit den zugeordneten Parametern nicht sehr eng korreliert (s. Abbildung 3-35 auf Seite 104), so dass das *updating* beide Bereiche getrennt erfassen kann. Die Struktur selbst hat einen größeren Einfluss auf die Ergebnislage als die Werte, die den Strukturen zugeordnet werden.

Propagationspfad SA

- A. Ein lokales *updating* der einzelnen Simulationen ist zwar hier auch nicht möglich, dafür bietet *Simulated Annealing* jedoch die Möglichkeit, über eine Modifizierung des Trainingsbildes Erkenntnisse über lokale Abweichungen von den Messwerten zu berücksichtigen.
- B. Ein weitergehendes *updating* der als Eingabe verwendeten *Sequential Indicator*-Simulationen und eventuell der hierfür gewählten Indikatorwertebereiche erscheint nicht sinnvoll, da nach den Erfahrungen im Anwendungsfall 1 hier keine Reduzierung der *a priori*-Unsicherheiten zu erwarten ist.

Propagationspfad MZ

- A. Auch hier wird wie im Propagationspfad TG eine Trennung zwischen Strukturgenerierung und Wertezuweisung vorgenommen. Der erste Schritt zum *updating* der Struktur ist nur manuell (subjektiv) auf Grundlage der Modellergebnisse möglich. Dies entspricht der Anpassung der Zonierung in der traditionellen *trial & error*-Kalibrierung. Hier sei auf die differierenden Ergebnisse in Bezug auf die 'besten' Simulationen zwischen Strömungs- und Transportrechnungen hingewiesen.
- B. Das *updating* der Indikatorwertebereiche, die der einzigen Struktur-Realisation zugeordnet wurden, ist nach den Ergebnissen der Anwendungsfälle nicht eindeutig möglich (Abbildung 3-39 auf Seite 108). Generell ist bei der Kombination vieler Parameter der Rückschluss auf die 'oberste Ebene' (z.B. generierte k_f -Werte an Einzelpunkten) fraglich.

5.1.3 Beispiel für die Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten

Für die tatsächliche Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten muss eine einzuhaltende Bedingung vorliegen, z.B. eine Konzentration oder ein Wasserstand der nicht unter- oder überschritten werden darf. Die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten können dann für einen Bezugspunkt angegeben werden.

Dies wird in der Praxis naturgemäß für Prognoseergebnisse erfolgen, bei denen mehrere Konzeptionsvarianten einer Sanierung miteinander verglichen werden können. Die Auswertung könnte dann wie in Abbildung 5-3 beispielhaft für einen Messpunkt (Fallstudie 2; Knoten: Zeile 32, Spalte 77; Fälle TB und TBC) gezeigt aussehen. Hierzu wurden jedoch keine Prognoserechnungen, sondern die bereits vorliegenden Rechenergebnisse mit historischen Daten verwendet. Im unkonditionalen Fall beträgt die Unterschreitungswahrscheinlichkeit für einen Grenzwert von 59.1 m+NN 40% und ist damit deutlich höher als im konditionalen Fall, wo diese nur 18% beträgt.

Eine andere praxisbezogene Auswerteform zur Quantifizierung der Aussageunsicherheiten ist die flächige Darstellung der Unter- bzw. Überschreitungswahrscheinlichkeit für einen vorzugebenen Richt- oder Grenzwert. Für zwei fiktive Grenzwerte ist dies als Beispiel in Abbildung 5-4 durchgeführt, wobei im unteren

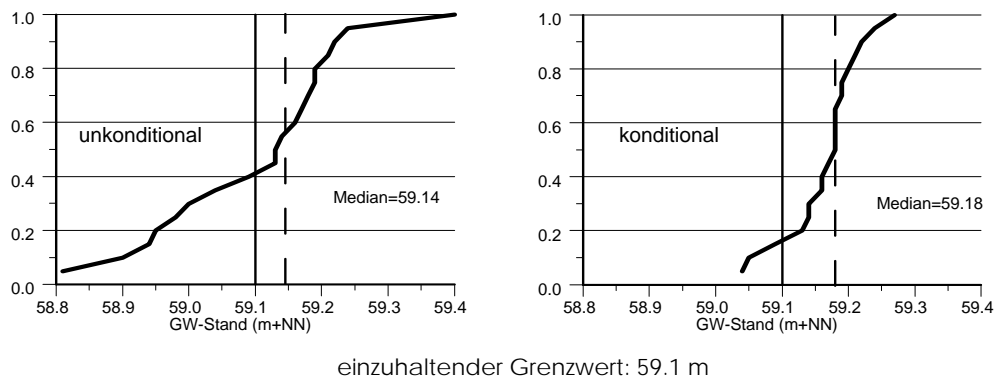


Abbildung 5-3: Unterschreitungswahrscheinlichkeit eines Grenzwerts an einem vorgebenen Punkt

Teil ein doppelt so hoher Wert gewählt wurde wie oben. Auch hier müsste eine derartige Analyse mit mindestens zwei verschiedenen Propagationspfaden erfolgen, um systematische Fehler zu minimieren.

5.1.4 Beschränkungen des SUFIX-Verfahrens

Bei einer großen Zahl von Parametern, die gleichzeitig als unsicher angesehen werden, ergibt sich zwangsläufig auch eine hohe Zahl möglicher Parameterkombinationen. Mit der aktuell verfügbaren Computertechnik ist es noch nicht möglich, etwa 10000 Rechenläufe in einem akzeptablen Zeitraum durchzuführen. Der prozentuale Anteil der durchführbaren Parameterkombinationen sinkt mit der Zahl der möglichen Kombinationen. Die Zahl der Parameter ist jedoch stark reduzierbar durch Anwendung von Indikatorverfahren, wobei die Klassenbreiten in den gewählten Intervallen als unsichere Parameter angesehen werden, oder es wird eine Zonierung durchgeführt und die den Zonen zugeordneten Werte stellen die unsicheren Parameter dar. Diese Ansätze zeigen sich zumindest bei mehr heterogenen Aquiferbedingungen als vorteilhafte Lösung. Das Problem der hohen Zahl an notwendigen Rechenläufen dürfte sich jedoch mit der weiterhin zu erwartenden Entwicklung der Rechnerleistung verringern.

Ein zu beachtender Nachteil des SUFIX-Verfahrens ist, dass ein einzelner Parameter, der eine hohe Unsicherheit aufweist, andere Parameter mit geringerer Unsicherheit 'überdecken' kann. Eine Reduzierung der Unsicherheit ist dann nicht möglich, wie die Anwendung von Indikatorverfahren in der Fallstudie 1 aufzeigte.

Voraussetzung für eine akzeptable Güte der Transportkalibrierung ist eine gute Strömungskalibrierung. Dass aber diese Bedingung nicht hinreichend ist, zeigen die Ergebnisse der Fälle mit vereinfachtem hydrogeologischem Modell (Vergleichsrechnungen TAE1 bzw. TEN1). Hier zeigt sich, dass die gute Strömungskalibrierung (Rang 1 bzw. Rang 2 in den Tabellen 5-1 und 5-3) nicht in gleichem Maße durch die Transportkalibrierung bestätigt wird (Rang 6 in beiden Fällen). Umgekehrt ist es möglich, dass schlecht kalibrierte Strömungsmodelle augenscheinlich gute Ergeb-

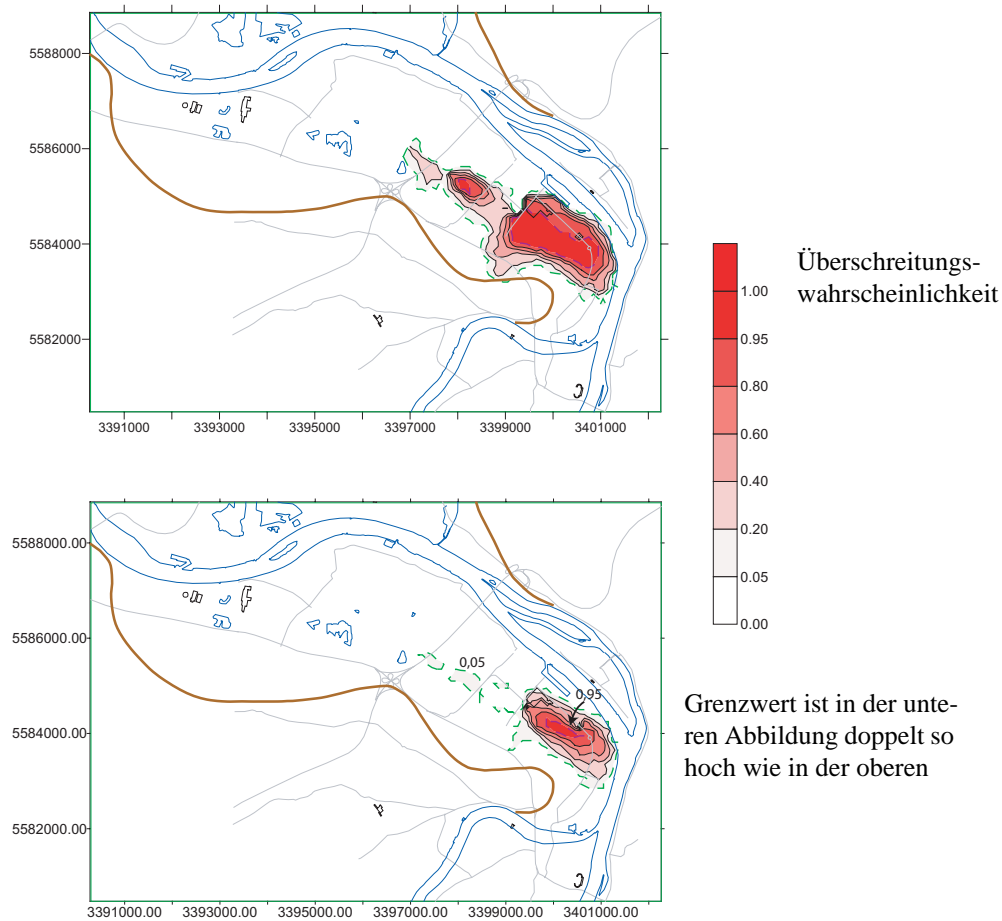


Abbildung 5-4: Flächige Überschreitungswahrscheinlichkeit eines Grenzwerts (Fallstudie 2; Fall TG)

nisse bei der Transportkalibrierung zeigen (Fall MZ in Tabelle 5-3). Wird sowohl bei der Strömungs- als auch bei der Transportkalibrierung eine hohe Ergebnisgüte erzielt, kann man von einer hohen Zuverlässigkeit der Prognoserechnungen ausgehen.

5.2 Ausblick

Als größte Hürde bei der stochastischen Generierung von Untergrundstrukturen und damit als das am dringendsten zu lösende Problem, haben sich in dieser Arbeit die mangelnden Möglichkeiten der Konditionierung der Simulationen herauskristalliert. Da die Simulationen den Kern des hydrogeologischen Modells darstellen, sind damit auch die Möglichkeiten der Verbesserung dieses Modells gegenüber den rein statistisch basierten Simulationen sehr eingeschränkt.

Mit Konditionierung ist zum einen die Einbeziehung von weiteren Informationen (neben den statistischen Kennwerten der Durchlässigkeit aus der Variogramm-

analyse) *bei* der Generierung der Simulationen gemeint und zum anderen das lokale updating der Simulationen *nach* einem Modellrechenlauf und dem Vergleich mit einer Zielfunktion. Die mathematischen Methoden der Konditionierung können jedoch in beiden Anwendungsfällen die gleichen sein.

Im zweiten Abschnitt soll auf die notwendige Verbesserungen bei der Bereitstellung der zur Modellierung verwendeten Daten eingegangen werden.

5.2.1 Konditionierung

Konditionierung mit deterministischen Elementen bzw. Strukturen.

Die Lage und Abmessung dieser Strukturen müssen in den Optimierungsprozess integriert werden. Im optimalen Fall sollten die mit *soft data* konditionierten stochastisch oder manuell zonierte Simulationen mit den lokalen Strukturen derjenigen Simulationen überlagert werden können, die über ein Ranking-Verfahren als lokal beste eingestuft wurden. Die endgültige Abbildung müsste damit aus den am besten geeigneten Bestandteilen verschiedener Simulationen und evtl. vorab bekannter deterministischer Strukturen *synthetisiert* werden.

Konditionierung mit Messungen.

Dies kann mit gemessenen **Grundwasserständen** und **Konzentrationen** der Wasserinhaltsstoffe erfolgen. Hier kann das *sequential self-calibration*-Verfahren (GÓMEZ-HERNÁNDEZ, 1997) als wegweisend für zukünftige Entwicklungen angesehen werden. Dieses Verfahren erlaubt es, die stochastischen Simulationen mit den gemessenen Wasserständen zu konditionieren; das Ablaufschema ist wie folgt:

- Generierung einer stochastischen Simulation, konditioniert mit den Messwerten der hydraulischen Durchlässigkeit,
- Lösen der Strömungsgleichung mit diesem Parameterfeld und den vorgegebenen Randbedingungen,
- Konditionierung auf die Grundwasserstände durch Modifizieren der Simulation und evtl. der Randbedingungen.
- Die drei Schritte werden so oft wiederholt, bis die gewünschte Anzahl von Simulationen erreicht ist.
- Die Modifizierung geschieht durch Ermittlung eines Korrekturterms an ausgewählten Punkten (*master locations*), der Term wird mittels eines Kriging-Verfahrens dann für jeden anderen Punkt des Modellnetzes angepasst. Für die Optimierung der Korrekturwerte wird jedoch die Grundwasser-Strömungsgleichung linearisiert, um den Rechenaufwand in Grenzen zu halten. Dieses Verfahren hat in einem Ringversuch mit insgesamt sieben geostatistisch basierten inversen Verfahren als bestes abgeschnitten (ZIMMERMANN et al., 1998). Das Verfahren ist im prinzipiellen Ablauf vergleichbar mit dem in dieser Arbeit eingesetzten Konditionierungsverfahren nach FOUQUET (1994).

Ein derartiges Optimierungsverfahren für stochastische Simulationen, das es erlaubt, auch eine Konditionierung auf gemessene Konzentrationen vorzunehmen, ist bisher nicht bekannt.

Das ideale Konditionierungsverfahren müsste es also ermöglichen, sämtliche Informationen über geologische Strukturen, hydrogeologische Messwerte, Grundwasserstandsmessungen und Konzentrationsmessungen über einen Optimierungsalgorithmus so zu verwerten, dass die generierten stochastischen Simulationen sämtlichen Daten Genüge tun.

Die Begrenzung der verfügbaren Rechnerleistung führt ebenfalls dazu, dass nur relativ grobe räumliche Diskretisierungen für die Abbildung der Heterogenität in einem numerischen Modell verwendet werden können. Dies kann zur Folge haben, dass bei sehr heterogenen Verhältnissen maßgebende Prozesse, wie z.B. die Ausbreitung entlang bevorzugter Fließwege, nicht abgebildet werden können, da die eigentlich vorhandenen Verbindungen von hohen bzw. geringen Durchlässigkeiten 'ausgemittelt' werden. Zur Lösung dieses Problems schlagen KUPFERSBERGER & DEUTSCH (1999) ein *ranking* der grobskaligen Modellergebnisse vor, anschließend werden die Simulationen mit der höchsten Wiedergabegüte räumlich verfeinert und für die endgültigen Berechnungen eingesetzt. Auch dieser Ansatz kann als richtungsweisend für die zukünftige praktische Anwendung von geostatistisch basierten Methoden der Unsicherheitsermittlung angesehen werden.

5.2.2 Datengrundlage

Die Datengrundlage, auf der Grundwassermodelle aufbauen müssen ist, für die Anwendung in Sanierungsfällen verbesserungswürdig.

Lokalisierung und Charakterisierung der Schadstoffe

Die Bewegung von Schadstoffen ist ein dynamischer Prozess, so dass zeitabhängige Informationen über die Lage einer Schadstofffahne als Voraussetzung für die Modellierung eine große Rolle spielen. Hier sollte eine adäquate Datengrundlage auch für die Planung und Umsetzung von Sanierungsmaßnahmen vorhanden sein. Die Lokalisierung und Beobachtung einer Schadstofffahne ist eine Aufgabe, die bisher mit nicht ausreichenden Verfahren durchgeführt wird. So sind indirekte (z.B. geophysikalische) Verfahren meist nicht geeignet, während direkte Bohrmethode sowohl teuer als auch eingeschränkt effektiv sind (US DEPARTMENT OF ENERGY, 2000). Daneben besteht die Gefahr, dass durch nicht ordnungsgemäß zu Messstellen umgebaute bzw. nicht fachgerecht verfüllte Bohrlöcher potentielle Ausbreitungswege für Schadstoffe geschaffen werden.

Die Möglichkeiten der Messung von physikalischen, chemischen und biologischen Eigenschaften der gefundenen Stoffe und die Ansätze, die diese in Beziehung zu den Eigenschaften des Untergrundes setzen, müssen weiterentwickelt werden. Dazu gehört auch das Wissen, welche Eigenschaften eines Stoffes das Transportverhalten im tatsächlich angetroffenen Untergrund maßgeblich bestimmen.

Konzeptionelles hydrogeologisches Modell

Die Sicherheit von Modellprognosen wird auch und vor allem durch die mangelhaften Möglichkeiten eingeschränkt, ein zutreffendes konzeptionelles hydrogeologisches Modell erstellen zu können. Sowohl die Erkundung als auch die Modellierung sind bisher nicht in der Lage, neben dem Transport von gelösten Stoffen in einem porösen Medium auch andere häufig anzutreffende Transportmechanismen sicher zu erfassen. Hierzu zählen z. B. kolloidaler Transport, Ausbreitung in einem Aquifer mit ausgeprägten bevorzugten Fließwegen sowie die Vielzahl von chemischen, biologischen und physikalischen Prozesse, denen die Stoffe unterworfen sind und die auch vor allem mit der jeweiligen Umgebung unterschiedlich interagieren. Die räumlichen Skalen dieser gekoppelten Reaktionen können so klein sein, dass eine Berücksichtigung auf der Diskretisierungsskala eines numerischen Modells schwierig sein kann. In stark heterogenen Untergrundbedingungen stellt es ein großes Problem dar, die notwendigen Vereinfachungen und Abschätzungen zur Verteilung der Modellparameter auf das Modellnetz so auszuführen, dass die maßgebenden Prozesse, die das System prägen, nachgebildet werden können.

5.3 Fazit

Als Gewinn des hier vorgestellten Verfahrens gegenüber den traditionellen Methoden der Modellkalibrierung und Parameteridentifikation kann man zusammenfassen:

- (1) Das SUFIX-Verfahren erlaubt die Quantifizierung von Prognoseunsicherheiten in Kombination mit beliebigen Methoden zur Abbildung der Untergrundheterogenität. Als Abbildungsmethoden mit dem größten Entwicklungspotential kann man generell diejenigen Verfahren ansehen, die auch nicht *Gauss*-verteilte Daten verwenden, wie z.B. die hier verwendeten indikatorbasierten Verfahren. Als potentiell ebenfalls sehr gut geeignetes Verfahren stellt sich *Simulated Annealing* in der Variante als Postprozessor zusammen mit einem frei definierbaren 'Trainingsbild' dar.
- (2) Die Berechnungsmethodik der Grundwasserströmung und des Stofftransportes ist keinen Einschränkungen, wie Linearisierung der Gleichungen u.ä. unterworfen.
- (3) Die Steuerung bzw. Beschränkung des Rechenaufwandes ist möglich durch entsprechende Wahl der Anzahl unsicherer Parameter und der Anzahl der Klassen bei der Vorgabe von *a priori* Verteilungen.
- (4) Sollen die Parameter optimiert werden, ist in praktischen Anwendungsfällen die Kopplung von stochastischer Simulation und z.B. einem *Bayes'schen Updating*-Verfahren eine einfach zu implementierende Lösung. Hiermit ist dann auch die Kalibrierung beliebiger Randbedingungen möglich, die z.B. als Parameter mit einer nominalen Kodierung berücksichtigt werden können. Für die Heterogenitätsabbildung ist jedoch weiterhin eine Beschränkung auf Verfahren mit manueller Zonie-

rung und damit auch eine Einschränkung bei den gewählten Strukturen in Größe und Form in Kauf zu nehmen. Die manuelle Zonierung bietet jedoch den Vorteil, dass grossräumige Strukturen zwanglos integriert werden können.

- (5) Unkonditionale Simulationen haben als Ergebnis immer statistisch homogene Verteilungen zur Folge. Die entstehenden Strukturen besitzen damit immer eine Periodizität. Durch eine nachträgliche Konditionierung der Simulationen, die aber auch im Verfahren selbst integriert werden kann, ist prinzipiell eine Anpassung an die tatsächlich gemessenen Werte möglich.

Die Verfügbarkeit geeigneter mathematischer Methoden zur belastbaren Modellierung von Grundwasserströmung und Stofftransport ist zwar Voraussetzung, aber noch nicht hinreichend. Man muss feststellen, dass die Quantifizierung der Prognoseunsicherheiten ausschließlich auf der Grundlage von stochastischen Simulation bisher nicht zufriedenstellend möglich ist. Speziell für die Prognose von Stofftransportvorgängen können sehr oft Strukturen von Bedeutung sein, die mit geostatistischen Verfahren nicht automatisch generierbar sind. Für eine erfolgreiche Modellierung und eine belastbare Ermittlung der Prognosesicherheit müssen die folgenden Voraussetzungen ebenfalls erfüllt sein:

- (1) Grundbedingung ist ein widerspruchsfreies, stimmiges, an den Einsatzzweck angepasstes konzeptionelles hydrogeologisches Modell.
- (2) Der Anwender bzw. Modellierer muss Kenntnisse über großräumige Strukturen besitzen, die sich aus der Genese des Untergrundes ergeben und nur durch eine fachliche Interpretation erreichbar sind. Hierzu gehören Schichtungen, Paläorinnen, anisotrope Bodeneigenschaften durch Terrassierung, usw..
- (3) Das Verfahren zur Abbildung der Heterogenität muss dem Aquifer angepasst gewählt werden. Gauss-basierte Verfahren, wie *Turning-Bands*, sind demnach am ehesten für die Simulation von relativ homogenen Aquiferen geeignet (Fallstudie 2), während bei sehr heterogenen Strukturen, d.h. großer Variabilität der Parameterwerte, am ehesten Indikatorbasierte Verfahren in Frage kommen (Fallstudie 1). Bei sehr heterogenen Untergrundverhältnissen kann die deterministische Überlagerung von übergeordneten Elementen von ausschlaggebender Bedeutung sein.
- (4) Es sollten mindestens zwei unterschiedliche Verfahren zur Abbildung der Heterogenität herangezogen werden, um eine Sicherheit zu erlangen, dass die für Prognosezwecke verwendeten Simulationen sowohl Strömungs- als auch Gütemesswerte gleich gut abbilden. Dieser Schritt kann auch als Testen unterschiedlicher hydrogeologischer Modellvorstellungen angesehen werden.
- (5) Sollen die Auswirkungen von Stofftransportprozessen prognostiziert werden, müssen Konzentrationsmesswerte, z.B. von einem Tracerversuch, vorhanden sein.

A Ergebnistabellen

A.1 Fallstudie 1

Erklärung der Bedeutung typischer Zielfunktionstypen (s.a. Abschnitt 2.7.2) in den nachstehenden Tabellen:

	ZF-Typ	IDI	ID-	-DI	-D-	III	-II
Zeit	stationäre Rechnung			x	x		x
	instationär (über alle Zeitschritte integriert)	x	x			x	
	instationär (Differenzierte Auswertung nach Zeitschritten)						
Ort	räumliche Integration über alle Messstellen					x	x
	räumliche Differenzierung nach Messstellen	x	x	x	x		
Simulation	deterministische Rechnung (nur 1 Simulation)		x		x		
	Integration über alle Simulationen	x		x		x	x
	differenzierte Auswertung nach Simulationen						

Tabelle A-1: Güte der Strömungsberechnung im Fall TBC - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

Messstelle	Lokale Residuen in [m]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil			
TS1.1F	0,04	0,03	0,001	0	0,13
TS1.2F	0,12	0,11	0,001	0,08	0,22
TS1.3F	0,23	0,2	0,002	0,17	0,34
TS2.1F	-0,05	-0,07	0,001	-0,09	0,04

Tabelle A-1: Güte der Strömungsberechnung im Fall TBC - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**) (Forts.)

TS2.2F	0,1	0,08	0,001	0,06	0,2
TS2.3F	0,12	0,11	0,002	0,06	0,24
TS3.1F	0,45	0,44	0,001	0,42	0,54
TS3.2F	0,43	0,41	0,002	0,4	0,55
TS3.3F	0,5	0,48	0,002	0,45	0,64
TS4.1F	0,18	0,17	0,001	0,16	0,27
TS4.2F	0,31	0,3	0,001	0,28	0,41
TS4.3F	0,43	0,41	0,002	0,39	0,54
Mittel (-II)	0,24	0,22			

Tabelle A-2: Güte der Strömungsberechnung im Fall TBC - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

Messstelle	Lokale Residuen in [m]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil			
TS1.1F	0,17	0,16	0,001	0,13	0,26
TS1.2F	0,18	0,16	0,001	0,13	0,27
TS1.3F	0,24	0,23	0,001	0,21	0,34
TS2.1F	0,08	0,07	0,001	0,04	0,19
TS2.2F	0,12	0,11	0,001	0,09	0,23
TS2.3F	0,16	0,16	0,001	0,11	0,28
TS3.1F	0,52	0,5	0,001	0,5	0,61
TS3.2F	0,51	0,49	0,001	0,47	0,61
TS3.3F	0,55	0,54	0,002	0,51	0,67
TS4.1F	0,6	0,6	0,001	0,59	0,68
TS4.2F	0,64	0,63	0,001	0,62	0,72
TS4.3F	0,88	0,86	0,001	0,85	0,98
Mittel (-II)	0,39	0,38			

Tabelle A-3: Güte der Transportrechnung im Fall TBC, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (Zielfunktionstyp **IDI**)

Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Min	Max
V19	0,99	0,75	0,06	0,42	1,4
TS2.1T	2,26	2,08	0,07	1,99	2,87
TS2.2T	0,66	0,54	0,03	0,43	1
V48	1,57	1,43	0,04	1	1,79
V24	2,74	2,63	0,01	2,32	2,85
TS2.3T	1,01	0,69	0,14	0,56	1,81
BR02	0,75	0,54	0,14	0,16	1,67
TS1.2T	2,07	1,67	0,2	1,25	3,54
V47	1,17	0,73	0,32	0,3	2,48
TS1.3T	1,84	1,17	0,36	0,59	3,17
V23	2,01	1,43	0,32	0,71	2,95
V51	1,38	1,34	0,2	0,79	3,78
TS1.1T	1,94	1,62	0,25	0,55	2,61
BR09	1,38	1,04	0,21	0,49	2,31
V08	1,59	1,58	0,02	1,42	2,16
V18	1,26	0,77	0,21	0,38	2,47
V22	1,62	1,42	0,05	0,98	1,99
TS5.1T	2,14	1,85	0,19	1,55	3,57
V43	2,7	2,68	0,002	2,66	2,82
TS3.1T	1,17	1,08	0,01	0,98	1,3
V10	1,77	1,68	0,04	1,17	1,99
TS3.2T	1,15	1,11	0,01	0,99	1,36
TS3.3T	1,09	1,04	0,007	0,83	1,21
BR15	0,63	0,62	0,005	0,56	0,88
BR11	0,7	0,68	0,02	0,59	1,18
TS4.3T	0,29	0,23	0,03	0,21	0,86
V52	0,33	0,31	0,01	0,28	0,76
TS4.2T	0,33	0,23	0,05	0,17	1,22
TS4.1T	0,22	0,17	0,04	0,11	1,15
V42	0,44	0,36	0,004	0,26	0,47
Mittel (III)	1,31	1,12			

Tabelle A-4: Güte der Strömungsberechnung im Fall TG - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

Messstelle	Lokale Residuen in [rn]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil, als Gütewert			
TS1.1F	0,18	0,14	0,002	0,02	0,25
TS1.2F	0,28	0,23	0,005	0,07	0,36
TS1.3F	0,39	0,34	0,011	-0,02	0,48
TS2.1F	0,08	0,05	0,003	-0,07	0,19
TS2.2F	0,24	0,2	0,003	0,08	0,31
TS2.3F	0,29	0,24	0,006	0	0,38
TS3.1F	0,56	0,53	0,002	0,41	0,66
TS3.2F	0,54	0,51	0,003	0,38	0,63
TS3.3F	0,6	0,57	0,004	0,42	0,7
TS4.1F	0,27	0,25	0,001	0,15	0,33
TS4.2F	0,39	0,36	0,002	0,25	0,47
TS4.3F	0,53	0,5	0,003	0,38	0,63
Mittel (-II)	0,36	0,33			

Tabelle A-5: Güte der Strömungsberechnung im Fall TG - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

Messstelle	Lokale Residuen in [m]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil, als Gütewert			
TS1.1F	0,31	0,27	0,002	0,15	0,38
TS1.2F	0,33	0,28	0,004	0,14	0,41
TS1.3F	0,4	0,36	0,007	0,13	0,48
TS2.1F	0,21	0,18	0,003	0,07	0,3
TS2.2F	0,26	0,23	0,002	0,11	0,34
TS2.3F	0,32	0,27	0,005	0,08	0,41
TS3.1F	0,63	0,6	0,002	0,48	0,72
TS3.2F	0,62	0,58	0,003	0,45	0,71
TS3.3F	0,66	0,64	0,003	0,49	0,75
TS4.1F	0,69	0,67	0,001	0,57	0,76
TS4.2F	0,71	0,69	0,002	0,58	0,79

Tabelle A-5: Güte der Strömungsberechnung im Fall TG - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

TS4.3F	0,99	0,96	0,002	0,83	1,07
Mittel (-II)	0,51	0,48			

Tabelle A-6: Güte der Transportrechnung im Fall TG, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ **IDI**)

Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Min	Max
V19	1,93	1,69	0,125	0,47	2,33
TS2.1T	3,05	3,02	0,039	2,02	3,21
TS2.2T	2,27	1,99	0,237	0,45	3,01
V48	2,67	2,46	0,165	1,01	3,09
V24	0,84	0,54	0,589	0,24	2,64
TS2.3T	1,57	1,15	0,204	0,51	2,14
BR02	0,33	0,28	0,018	0,18	0,69
TS1.2T	0,42	0,34	0,036	0,23	1,17
V47	0,61	0,47	0,023	0,32	0,89
TS1.3T	0,66	0,47	0,04	0,19	1,02
V23	0,56	0,42	0,03	0,24	0,94
V51	0,79	0,43	0,239	0,23	2,07
TS1.1T	2,2	1,94	0,097	1,56	2,72
BR09	0,27	0,14	0,066	0,09	1,02
V08	1,66	1,14	0,175	0,71	2,07
V18	1,05	0,93	0,022	0,81	1,54
V22	1,3	0,89	0,142	0,44	1,68
TS5.1T	2,14	1,98	0,089	1,22	2,29
V43	0,69	0,46	0,453	0,27	2,61
TS3.1T	1,28	1,07	0,096	0,88	2,02
V10	1,07	0,96	0,06	0,62	1,79
TS3.2T	1,21	0,89	0,185	0,3	1,86
TS3.3T	0,65	0,58	0,028	0,49	1,19
BR15	0,29	0,24	0,136	0,15	2,46
BR11	0,28	0,26	0,011	0,21	0,61
TS4.3T	0,44	0,38	0,025	0,23	1,05
V52	0,3	0,3	0,001	0,29	0,5

Tabelle A-6: Güte der Transportrechnung im Fall TG, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ **IDI**) (Forts.)

TS4.2T	1,23	1,09	0,067	0,43	1,92
TS4.1T	1,17	1,06	0,026	0,66	1,57
V42	0,48	0,32	0,021	0,3	0,72
Mittel (III)	1,11	0,93			

Tabelle A-7: Güte der Strömungsberechnung im Fall SA - Flach - als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

	Lokale Residuen [m]				
Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Minimum	Maximum
TS1.1F	0,31	0,25	0,01088243	0,04	0,47
TS1.2F	0,13	0,07	0,01393453	-0,21	0,35
TS1.3F	0,01	-0,23	0,06653679	-0,68	0,35
TS2.1F	0,30	0,25	0,00958423	0,06	0,49
TS2.2F	0,30	0,25	0,0054491	0,16	0,44
TS2.3F	0,12	0,04	0,01818213	-0,19	0,37
TS3.1F	0,69	0,6	0,01408453	0,50	0,96
TS3.2F	0,48	0,39	0,01546547	0,25	0,72
TS3.3F	0,50	0,41	0,0201503	0,24	0,73
TS4.1F	0,32	0,25	0,00631111	0,20	0,50
TS4.2F	0,33	0,26	0,00732447	0,14	0,46
TS4.3F	0,42	0,31	0,01353529	0,07	0,57
Mittel (-II)	0,36	0,24			

Tabelle A-8: Güte der Strömungsberechnung im Fall SA - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)

	Lokale Residuen [m]				
Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Minimum	Maximum
TS1.1F	0,25	0,20	0,00779414	0,05	0,4
TS1.2F	0,20	0,13	0,0117548	-0,15	0,37
TS1.3F	0,19	0,10	0,03299414	-0,30	0,46
TS2.1F	0,20	0,15	0,00446186	0,04	0,32

Tabelle A-8: Güte der Strömungsberechnung im Fall SA - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Zielfunktionstyp **-DI**)(Forts.)

	Lokale Residuen [m]				
Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Minimum	Maximum
TS2.2F	0,28	0,23	0,00415285	0,15	0,39
TS2.3F	0,18	0,11	0,01422432	-0,14	0,38
TS3.1F	0,66	0,60	0,01101321	0,50	0,87
TS3.2F	0,49	0,41	0,01323679	0,25	0,70
TS3.3F	0,52	0,42	0,01636336	0,28	0,71
TS4.0,1F	0,3	0,24	0,00515285	0,19	0,45
TS4.2F	0,35	0,28	0,00646922	0,17	0,45
TS4.3F	0,45	0,35	0,01084414	0,2	0,57
Mittel: (-II)	0,37	0,27			

Tabelle A-9: Güte der Transportrechnung im Fall SA, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ **IDI**)

Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Min	Max
V19	0,82	0,55	0,122	0,48	1.84
TS2.1F	2.89	2.51	0,100	2.02	3.06
TS2.2F	0,70	0,55	0,275	0,09	2.46
V48	1.66	1.50	0,294	0,73	3.44
V24	2.68	2.61	0,240	1.21	4.22
TS2.3F	0,83	0,60	0,326	0,49	3.03
BR02	1.17	0,86	0,303	0,38	2.47
TS1.2F	1.99	1.66	0,216	1.04	2.78
V47	1.43	1.23	0,180	0,79	2.41
TS1.3F	1.72	1.53	0,140	0,96	2.43
V23	1.85	1.47	0,129	1.09	2.35
V51	1.40	1.33	0,026	1.29	1.90
TS1.1	1.76	1.32	0,212	0,89	2.47
BR09	1.08	0,77	0,140	0,54	1.87
V08	1.61	1.60	0,002	1.54	1.76
V18	0,62	0,48	0,088	0,35	1.39
V22	1.41	1.32	0,019	1.19	1.76
TS5.1	2.11	1.79	0,089	1.23	2.36

Tabelle A-9: Güte der Transportrechnung im Fall SA, RMSE über die Zeit und alle Simulationen integriert, in [mg/l] (ZF-Typ **IDI**) (Forts.)

Messstelle	Median	Low Quartil	Varianz	Min	Max
V43	2.67	2.67	0,097	0,91	2.80
TS3.1	1.17	1.01	0,018	0,78	1.28
V10	1.85	1.74	0,046	0,65	1.93
TS3.2	1.24	1.19	0,004	0,98	1.26
TS3.3	1.23	1.18	0,008	0,90	1.27
BR15	0,63	0,62	0,001	0,55	0,64
BR11	0,85	0,75	0,068	0,55	1.68
TS4.3	1.28	1.08	0,049	0,63	1.50
V52	0,67	0,52	0,096	0,29	1.57
TS4.2	1.56	1.45	0,038	0,80	1.81
TS4.1	1.23	1.08	0,066	0,63	1.74
V42	0,48	0,37	0,074	0,31	1.08
Mittel (III)	1,42	1,24			

Tabelle A-10: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE1 als Differenz Rechnung-Messung (Zielfunktionstyp **-D-**)

Messstelle	Lokale Residuen (m).	
	- Flach -	- Tief -
TS1.1	-0,11	0,02
TS1.2	-0,04	0,04
TS1.3	0,01	0,08
TS2.1	0,28	0,17
TS2.2	0,2	0,11
TS2.3	0,12	0,1
TS3.1	0,23	0,3
TS3.2	0,2	0,28
TS3.3	0,25	0,32
TS4.1	0,16	0,44
TS4.2	-0,1	0,28
TS4.3	-0,08	0,5
RMSE (-I-)	0,17	0,27

Tabelle A-11: Güte der Transportberechnung im Fall TAE1 (ZF-Typ **ID-**)

Messstelle	RMSE über die Zeit integriert [mg/l]	Messstelle	RMSE über die Zeit integriert [mg/l]
V19	1,47	V22	1,24
TS2.1T	2,49	TS5.1T	2,23
TS2.2T	0,76	V43	2,66
V48	1,76	TS3.1T	1,1
V24	2,77	V10	1,66
TS2.3T	0,59	V45	0,35
BR02	0,59	TS3.2T	0,99
TS1.2T	2,21	TS3.3T	0,98
V47	1,47	BR15	0,49
TS1.3T	1,69	BR11	0,86
V23	1,58	TS4.3T	1,08
V51	1,35	V52	0,58
TS1.1T	2,23	TS4.2T	1,44
BR09	1,42	TS4.1T	0,81
V08	1,63	V42	0,37
V18	1,43		
RMSE (II-)	1,36		

Tabelle A-12: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE2 als Differenz Rechnung-Messung (ZF-Typ -D-)

Messstelle	Lokale Residuen (m). - Flach -	Lokale Residuen (m). - Tief -
TS1.1	-0,07	0,05
TS1.2	0,03	0,08
TS1.3	0,16	0,14
TS2.1	0,31	0,18
TS2.2	0,22	0,12

Tabelle A-12: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE2 als Differenz Rechnung-Messung (ZF-Typ -D-) (Forts.)

TS2.3	0,15	0,13
TS3.1	0,31	0,37
TS3.2	0,24	0,36
TS3.3	0,27	0,41
TS4.1	0,23	0,59
TS4.2	0,15	0,45
TS4.3	0,18	0,66
RMSE (-I-)	0,21	0,36

Tabelle A-13: Güte der Simulationsberechnung im Fall TAE5 - Flach -, als lokale Residuen über alle Simulationen integriert.

Messstelle	Lokale Residuen [m]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil			
TS1.1F	0,01	0,02	0,01	-0,07	0,46
TS1.2F	0,1	0,07	0,01	0,01	0,3
TS1.3F	0,15	0,1	0,01	0,04	0,4
TS2.1F	0,01	-0,005	0,09	-0,05	0,88
TS2.2F	0,07	0,05	0,01	0	0,31
TS2.3F	0,13	0,09	0,01	0,03	0,3
TS3.1F	0,32	0,28	0,01	0,23	0,71
TS3.2F	0,23	0,18	0,01	0,11	0,43
TS3.3F	0,28	0,22	0,01	0,17	0,49
TS4.1F	0,08	0,04	0	0,01	0,23
TS4.2F	0,07	0,02	0	-0,04	0,26
TS4.3F	0,16	0,06	0,01	0	0,38
Mittel (-II)	0,13	0,09			

Tabelle A-14: Güte der Strömungsberechnung im Fall TAE5 - Tief- als lokale Residuen über alle Simulationen (Gütekriterium -DI)

Messstelle	Lokale Residuen [m]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil			
TS1.1F	0,15	0,13	0,007	0,09	0,37
TS1.2F	0,18	0,16	0,004	0,11	0,36
TS1.3F	0,23	0,18	0,004	0,12	0,39
TS2.1F	0,14	0,1	0,017	0,08	0,5
TS2.2F	0,1	0,08	0,004	0,03	0,27
TS2.3F	0,19	0,16	0,004	0,12	0,37
TS3.1F	0,4	0,36	0,006	0,3	0,58
TS3.2F	0,32	0,26	0,006	0,17	0,52
TS3.3F	0,37	0,29	0,006	0,22	0,55
TS4.1F	0,47	0,44	0,004	0,41	0,62
TS4.2F	0,41	0,35	0,005	0,28	0,59
TS4.3F	0,64	0,53	0,008	0,47	0,85
Mittel (-II)	0,3	0,25			

Tabelle A-15: Güte der Transportrechnung im Fall TAE5 (Gütekriterium **IDI**)

Messstelle	RMSE [mg/l]		Varianz	Min	Max
	Median	Low Quartil			
V19	0,7	0,59	0,05	0,52	1,46
TS2.1F	2,43	2,22	0,07	2,02	2,81
TS2.2F	1,07	0,82	0,08	0,48	1,41
V48	1,44	1,08	0,08	0,94	1,95
V24	0,97	0,66	0,12	0,49	1,94
TS2.3F	1,3	0,91	0,09	0,53	1,63
BR02	0,48	0,41	0,01	0,28	0,76
TS1.2F	0,61	0,43	0,04	0,25	0,97
V47	0,6	0,51	0,02	0,36	0,89
TS1.3F	0,49	0,4	0,02	0,24	0,89
V23	0,5	0,43	0,01	0,36	0,76
V51	0,97	0,62	0,19	0,21	1,82
TS1.1	2,67	2,61	0,04	1,75	2,74

Tabelle A-15: Güte der Transportrechnung im Fall TAE5 (Gütekriterium **IDI**) (Forts.)

BR09	0,57	0,39	0,04	0,28	1,06
V08	2,09	2	0,03	1,64	2,34
V18	1,12	0,98	0,02	0,71	1,24
V22	0,82	0,51	0,28	0,43	1,79
TS5.1	2,17	2,13	0,002	2,09	2,3
V43	1,74	0,9	0,48	0,58	2,68
TS3.1	1,03	0,92	0,03	0,8	1,34
V10	1,3	0,92	0,13	0,65	1,65
TS3.2	0,66	0,47	0,12	0,27	1,37
TS3.3	0,72	0,61	0,03	0,52	0,96
BR15	0,55	0,37	0,25	0,25	1,75
BR11	0,46	0,26	0,04	0,18	0,81
TS4.3	0,71	0,54	0,03	0,39	0,89
V52	0,3	0,2	0	0,28	0,34
TS4.2	1,22	1,04	0,05	0,74	1,56
TS4.1	1,24	1,13	0,01	0,97	1,43
V42	0,41	0,34	0,07	0,3	0,98
Mittel (III)	1,04	0,85			

A.2 Fallstudie 2

Tabelle A-16: Zuordnung der Messstellennummern in den Abbildungen 4-33, 4-34, 4-36, 4-38, 4-40 und 4-41 zu den tatsächlichen Namen.

Nr. der Messstelle	Messstellen name	Nr. der Messstelle	Messstellen name	Nr. der Messstelle	Messstellen name
1	5026	21	5034	41	B14
2	31R	22	MB2	42	B16
3	5025	23	MB1	43	E5
4	RHI	24	34	44	B21
5	E30	25	E14	45	B17
6	RHIII	26	E29	46	NM8
7	35R	27	B2	47	NM7
8	34R	28	B4	48	E4
9	5027	29	5077	49	NM10
10	36R	30	E12a	50	E9
11	RHIV	31	B18	51	E3
12	43R	32	B11	52	NM4
13	RHV	33	E7	53	NM5
14	37R	34	E11	54	NM6
15	MB4	35	B19	55	NM3
16	RHVI	36	B13	56	SE1
17	MB3	37	B15	57	E1
18	5028	38	NM9	58	3
19	44R	39	B20	59	ST1
20	MB5	40	B22	60	NM1
				61	NM2

B Ergebnisabbildungen zur Fallstudie 1

B.1 Korrelation zwischen hard- und soft data

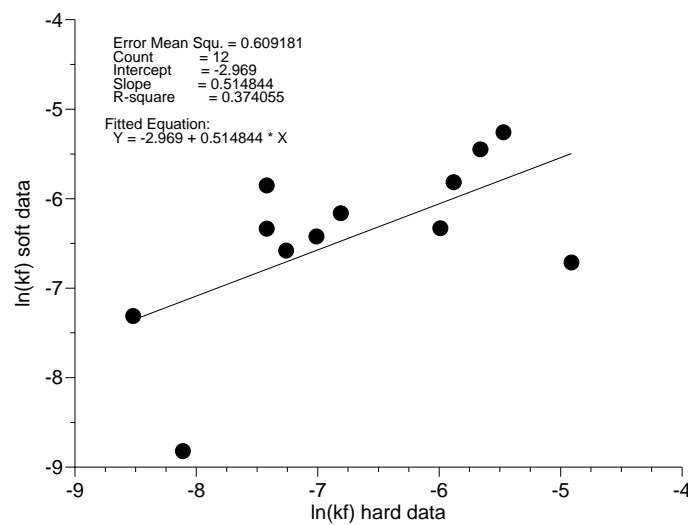


Abbildung B-1: Korrelation zwischen hard und soft data in Modellschicht 1

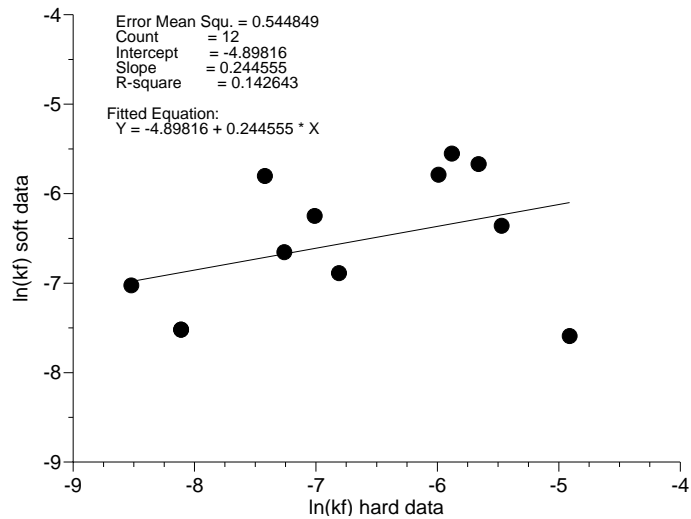


Abbildung B-2: Korrelation zwischen hard und soft data in Modellschicht 2

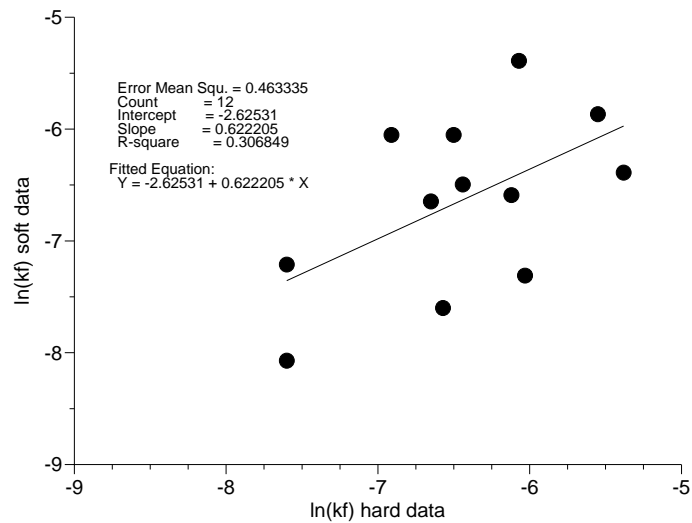


Abbildung B-3: Korrelation zwischen hard und soft data in Modellschicht 3

B.2 Manuelle Zonierung

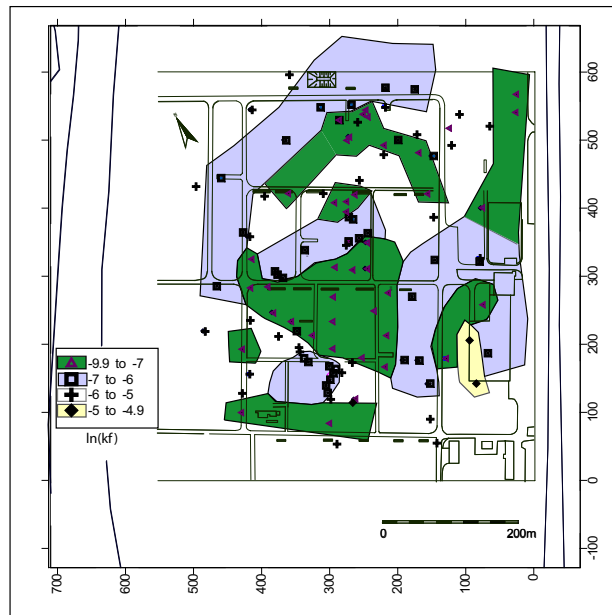


Abbildung B-4: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der soft data (Schicht1 (83-86m+NN), Fall TAE4 und MZ)

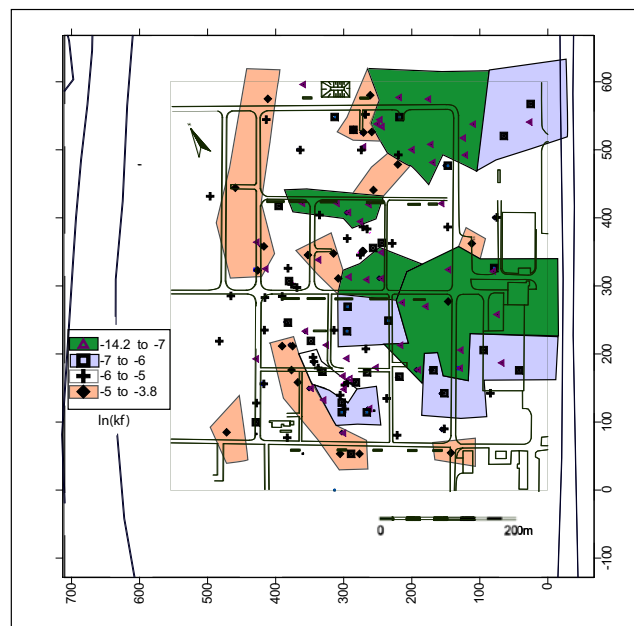


Abbildung B-5: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der soft data (Schicht2 (80-83m+NN), Fall TAE4 und MZ)

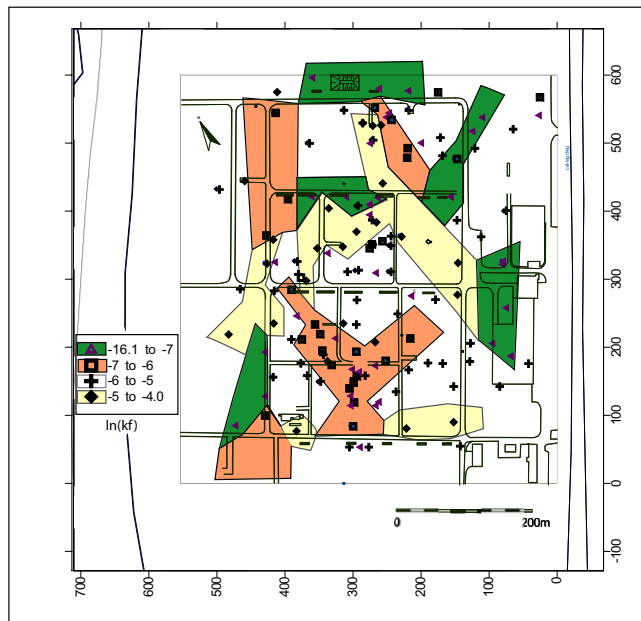


Abbildung B-6: Abgrenzung der k_f -Bereiche bei Integration der soft data (Schicht3 (70-80m+NN), Fall TAE4 und MZ)

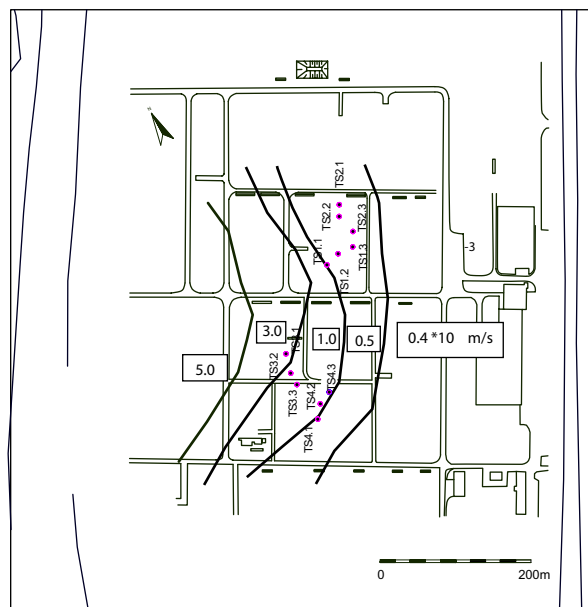


Abbildung B-7: Abgrenzung der k_f -Bereiche Trial-and-Error Verfahren (Fall TAE1)

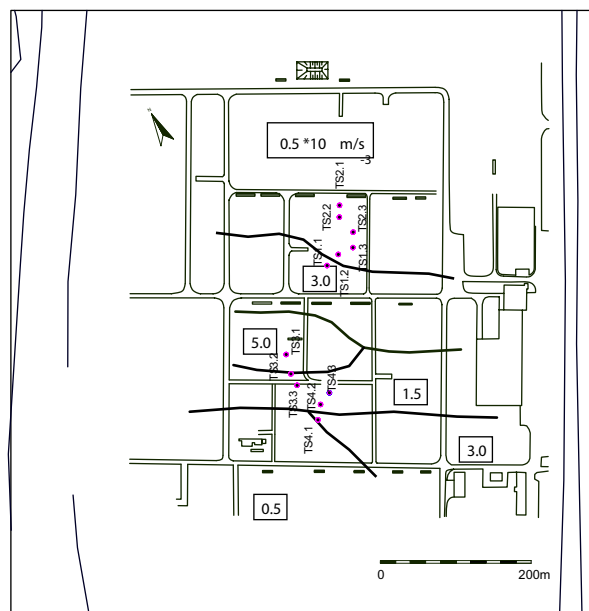


Abbildung B-8: Abgrenzung der k_F -Bereiche Trial-and-Error Verfahren (Fall TAE2)

B.3 Die Heterogenitätsabbildungen nach dem Cokriging Verfahren

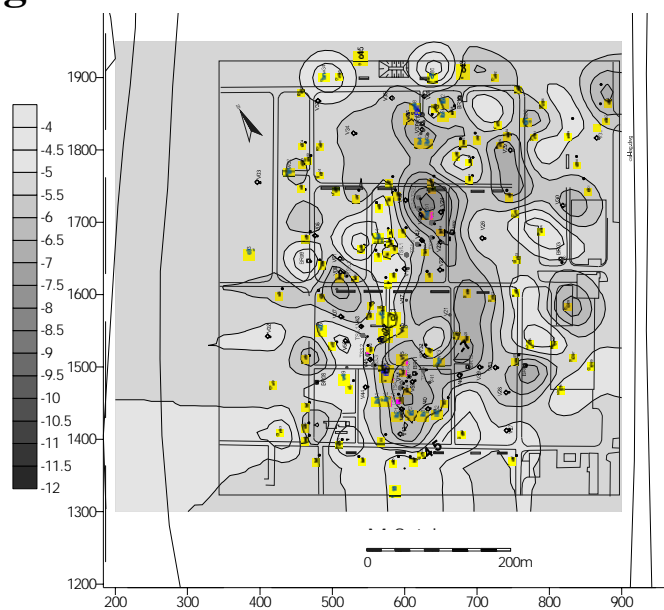


Abbildung B-9: Abgrenzung der k_F -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht1

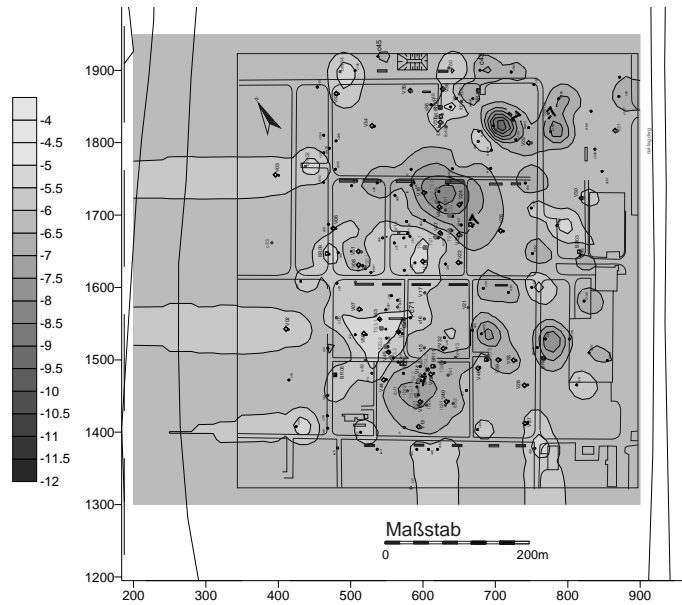


Abbildung B-10: Abgrenzung der k_f -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht2

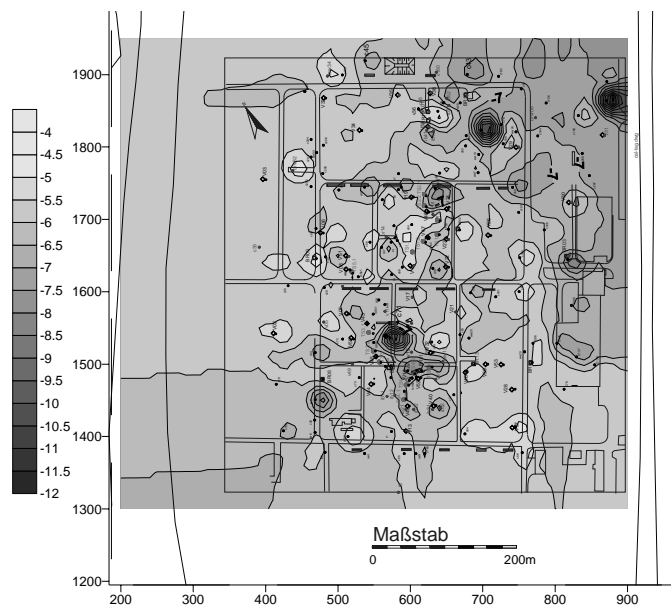


Abbildung B-11: Abgrenzung der k_f -Bereiche Cokriging (Fall COK) - Modellschicht3

B.4 Ergebnisse der numerischen Modellierung

Erklärung der Bedeutung typischer Zielfunktionstypen in den nachstehenden Abbildungen:

	ZF-Typ	IDI	ID-	-DI	-D-	III	-II
Zeit	stationäre Rechnung			X	X		X
	instationär (über alle Zeitschritte integriert)	X	X			X	
	instationär (Differenzierte Auswertung nach Zeitschritten)						
Ort	räumliche Integration über alle Messstellen					X	X
	räumliche Differenzierung nach Messstellen	X	X	X	X		
Simulation	Deterministische Rechnung (nur 1 Simulation)		X		X		
	Integration über alle Simulationen	X		X		X	X
	Differenzierte Auswertung nach Simulationen						

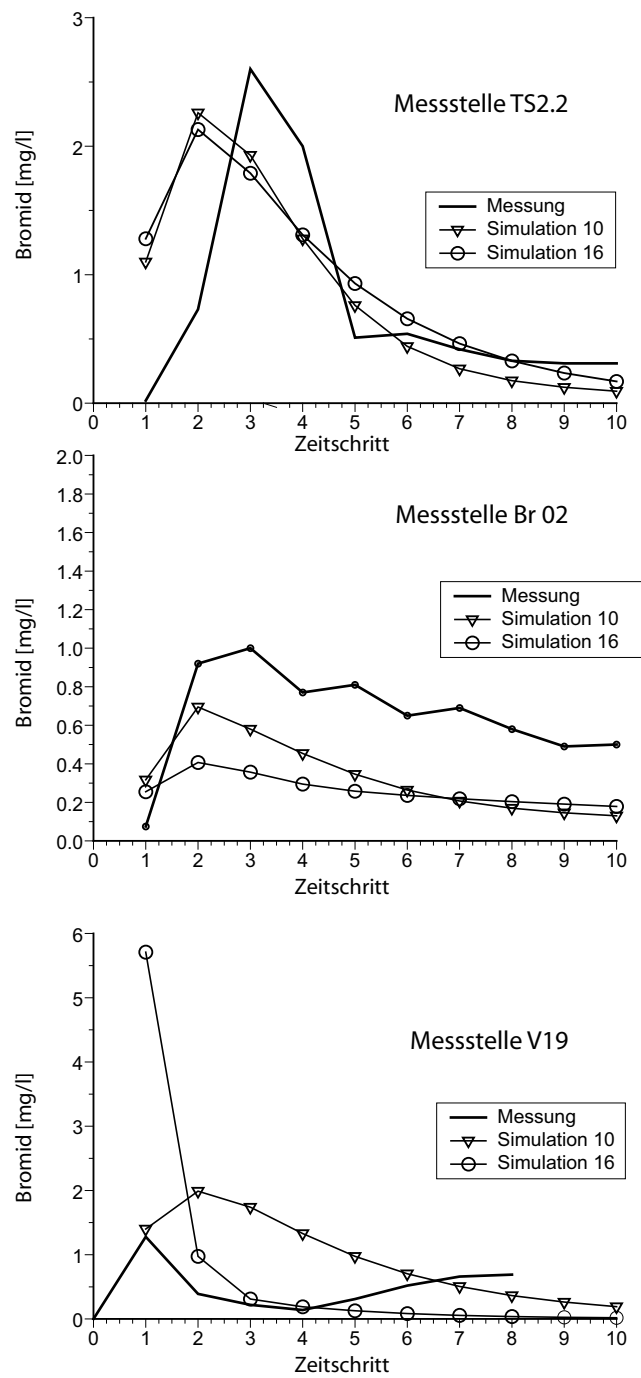


Abbildung B-12: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 global besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TB)

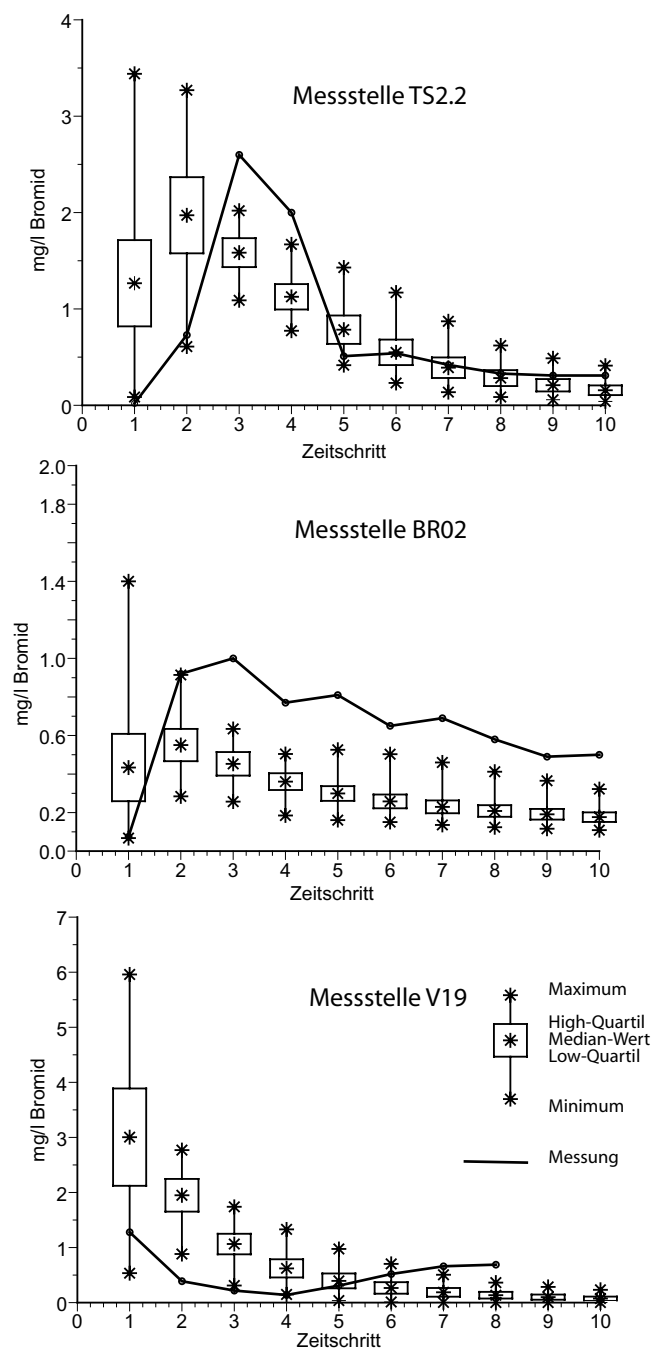


Abbildung B-13: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als mean-box Darstellung (Fall TB)

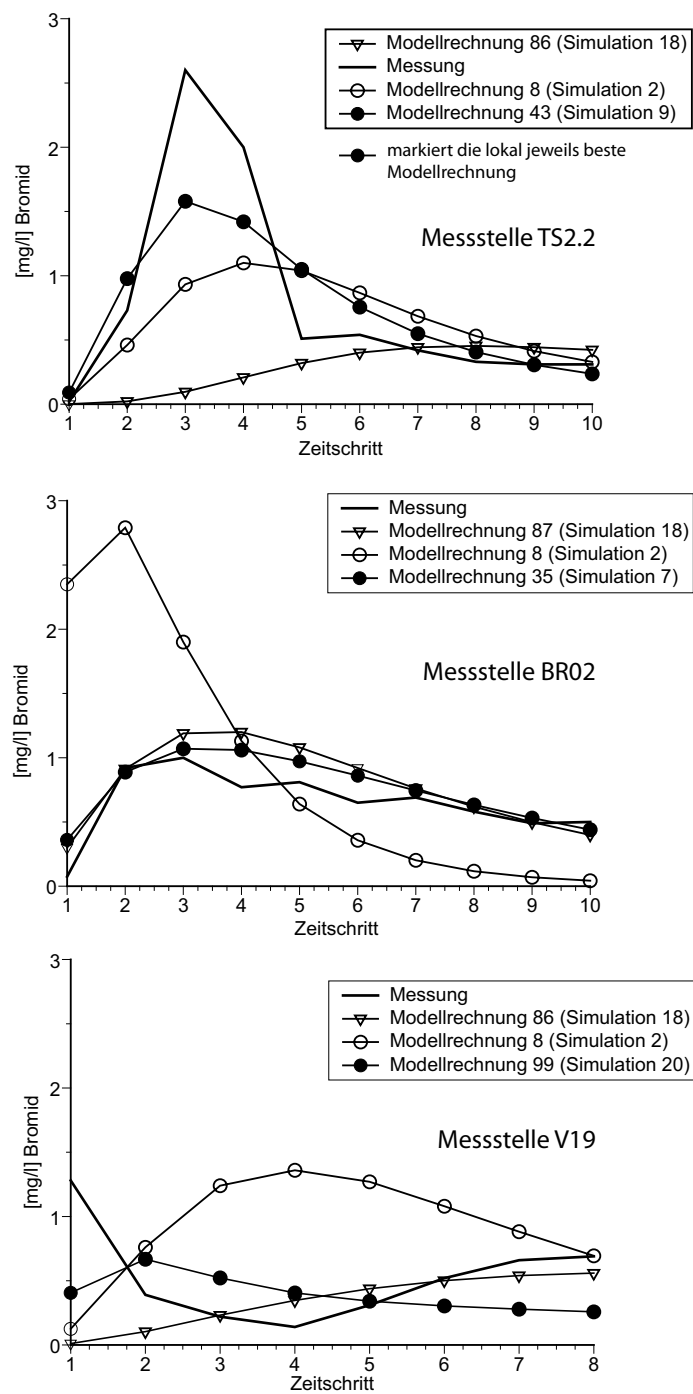


Abbildung B-14: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten globalen und der jeweiligen besten lokalen Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messtellen (Fall TBC)

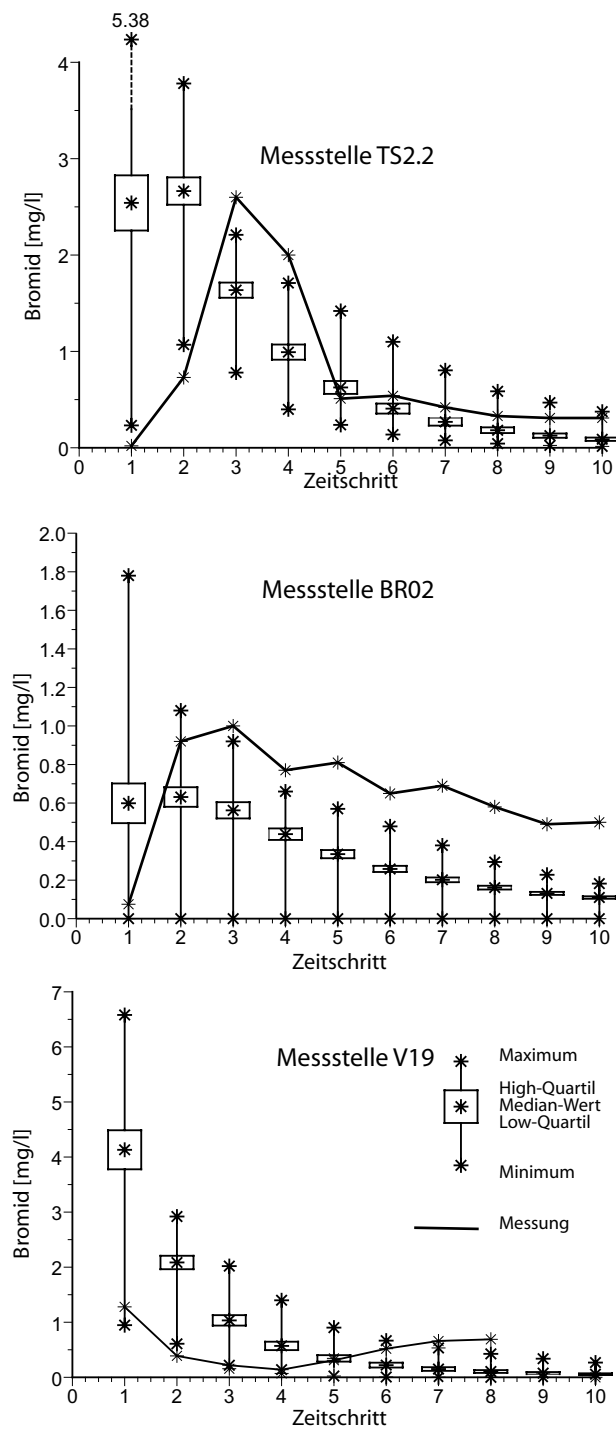


Abbildung B-15: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als mean-box Darstellung (Fall TBC)

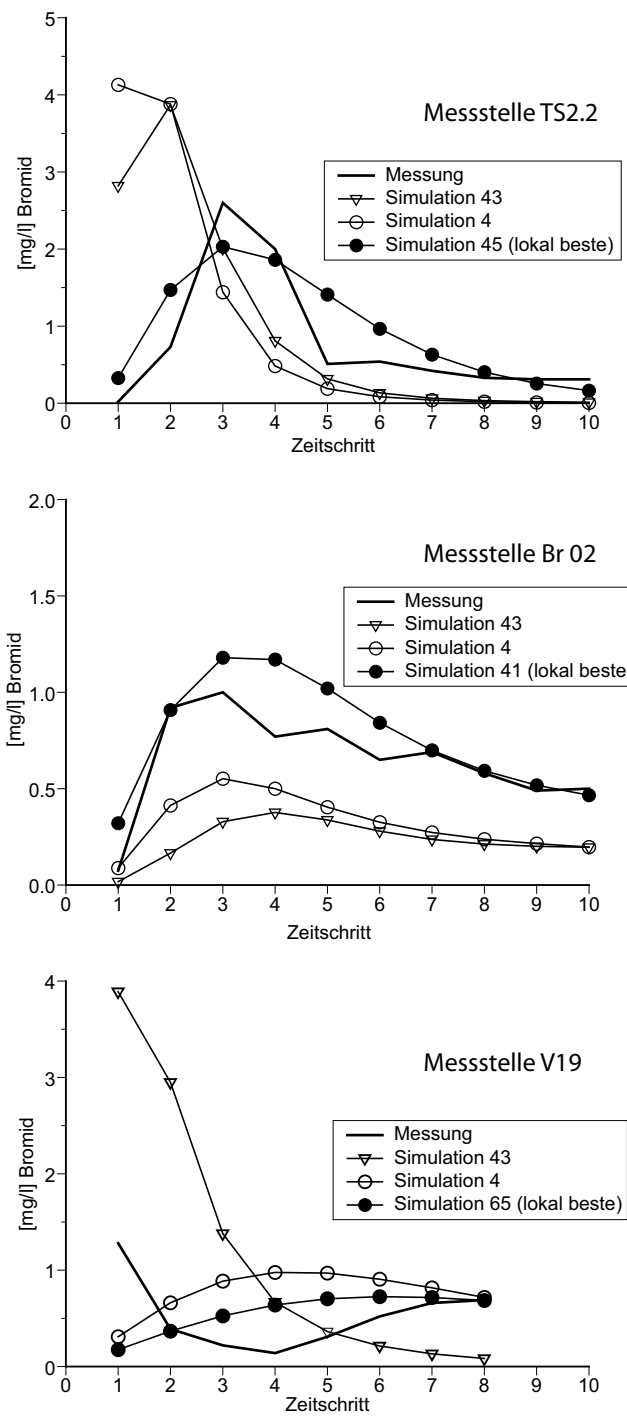


Abbildung B-16: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall TG)

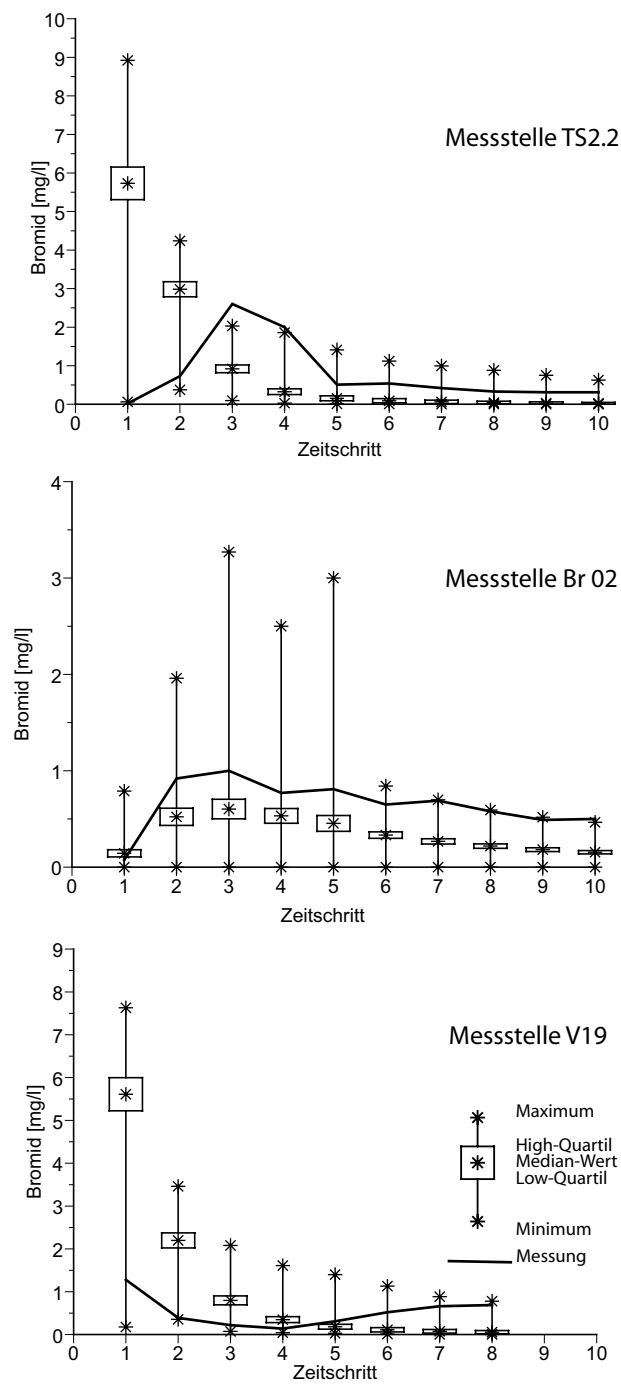


Abbildung B-17: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als mean-box Darstellung (Fall TG)

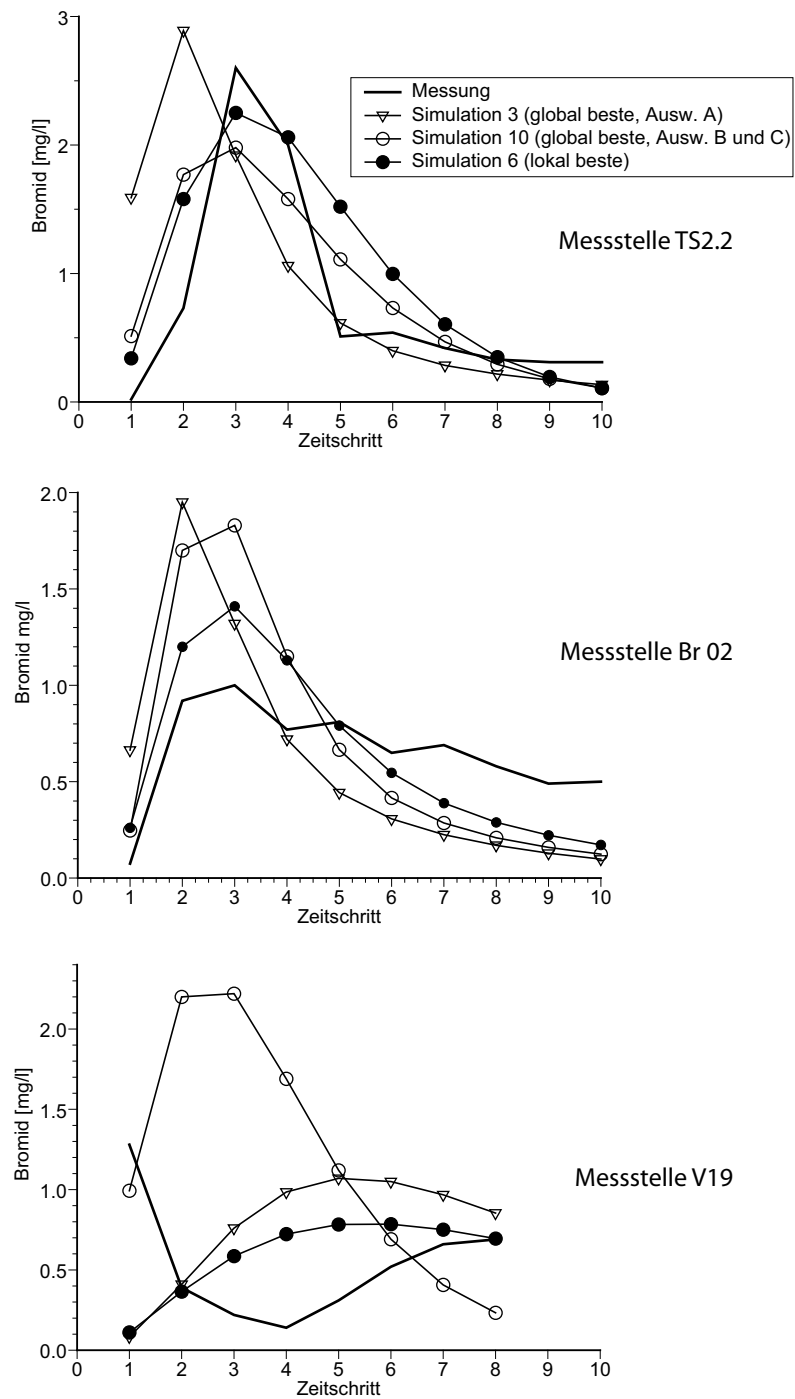


Abbildung B-18: Vergleich der Modellergebnisse auf Grundlage der 2 besten Simulationen mit den Messungen an 3 ausgewählten Messstellen (Fall MZ)

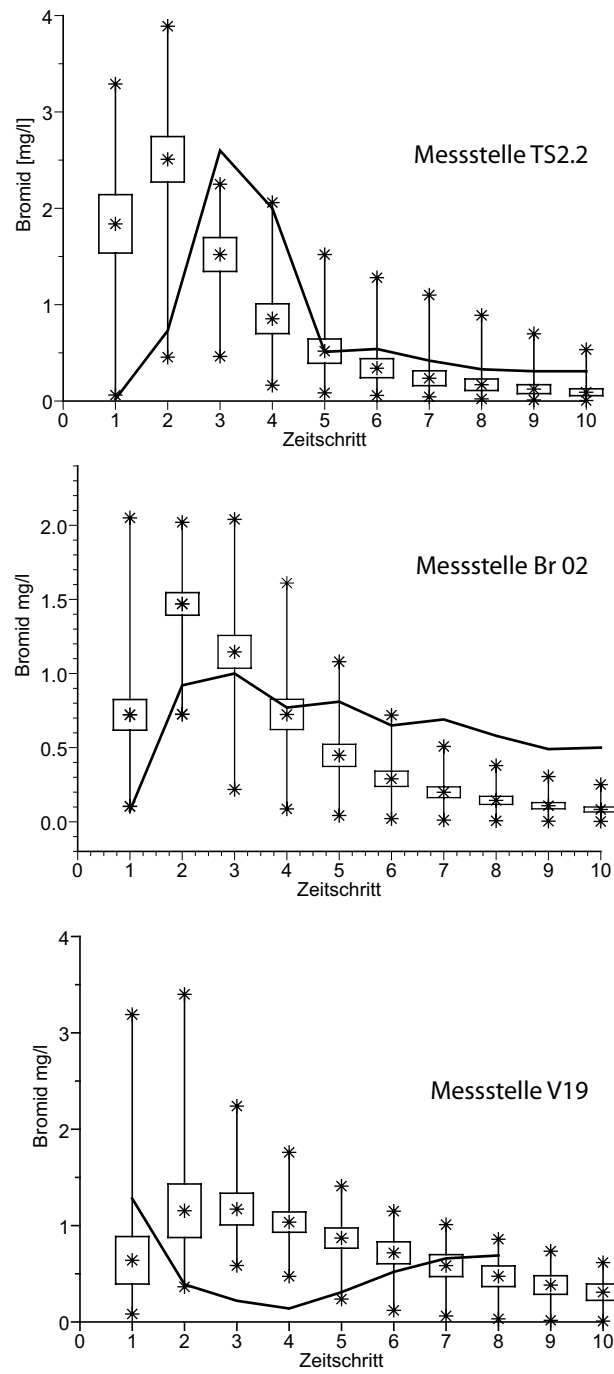


Abbildung B-19: Vergleich der Modellergebnisse an 3 ausgewählten Messstellen als mean-box Darstellung (Fall MZ)



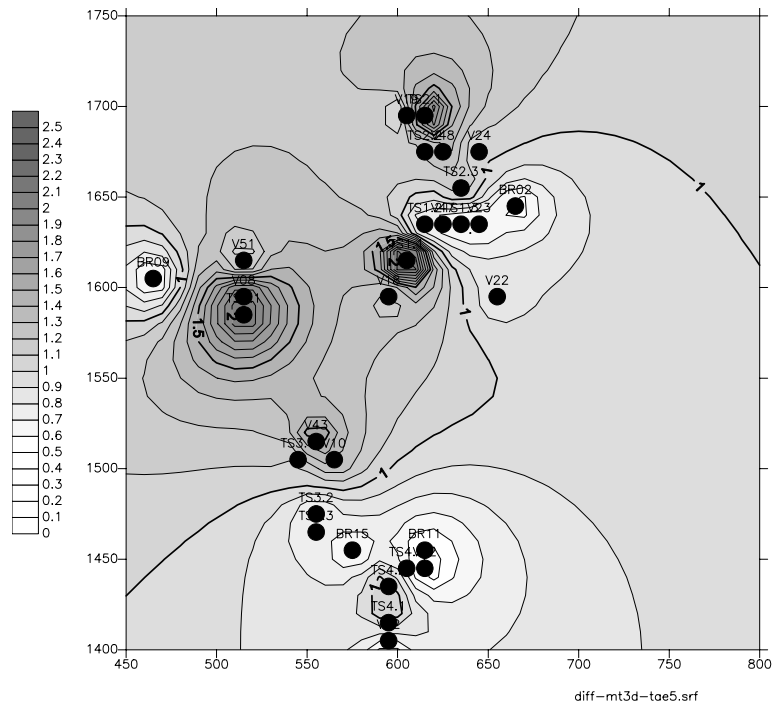


Abbildung B-22: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall MZ aus Tabelle A-15 (ZF-Typ IDI)

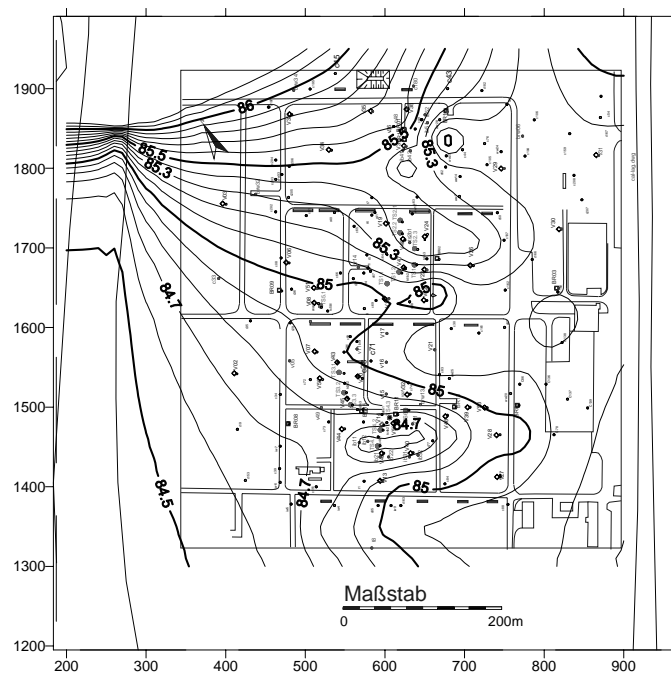


Abbildung B-23: Grundwasserhöhengleichungen im Fall TAE1

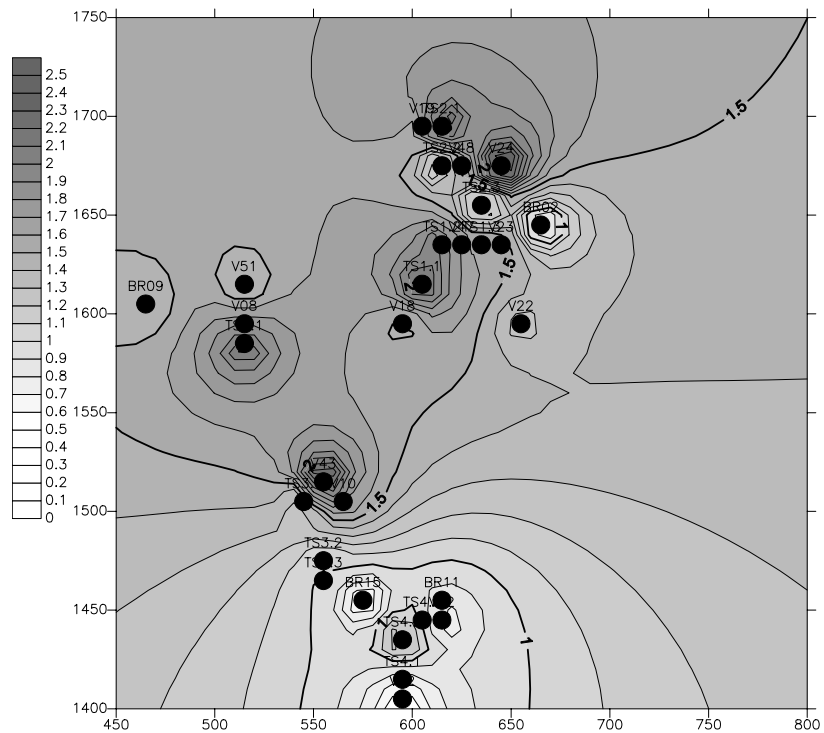


Abbildung B-24: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TAE1 aus Tabelle A-11 (ZF-Typ ID-)

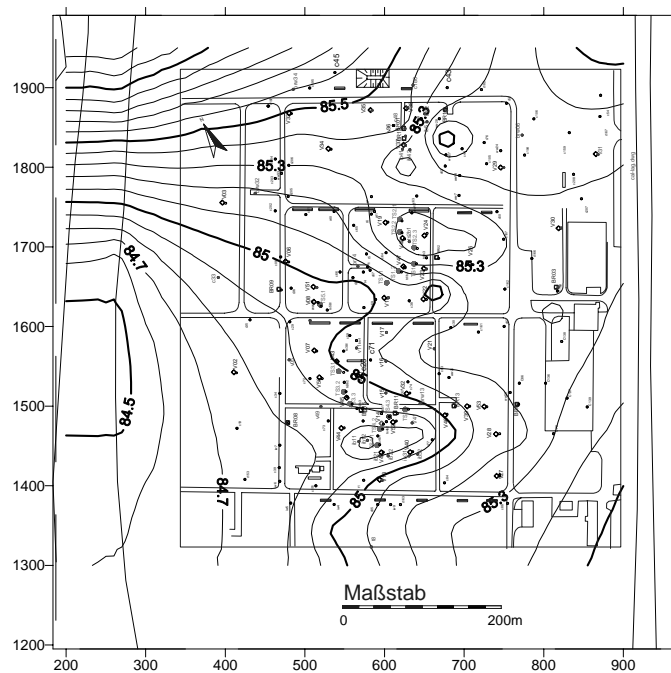


Abbildung B-25: Grundwasserhöhengleichen im Fall TAE2

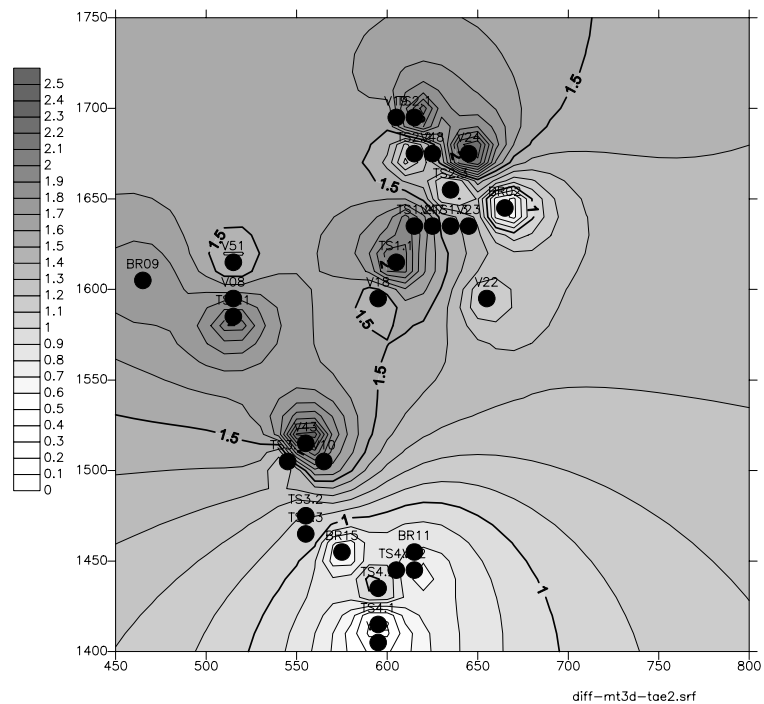


Abbildung B-26: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall TAE2 (ZF-Typ ID-)

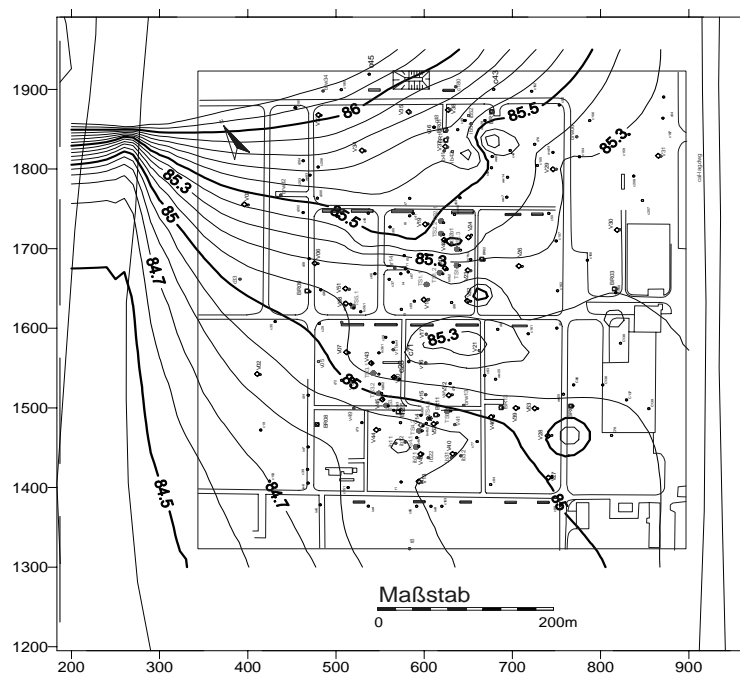


Abbildung B-27: Grundwasserhöhengleichen im Fall TAE4

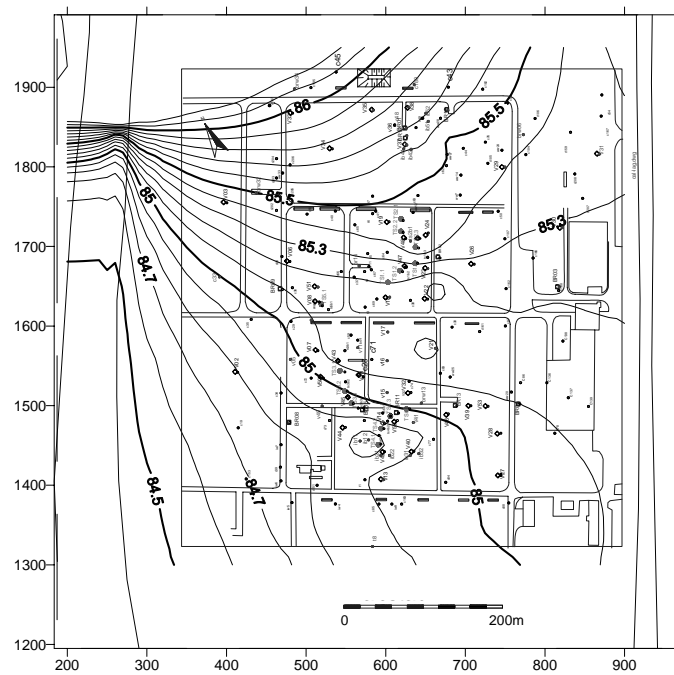


Abbildung B-28: Grundwasserhöhengleichen im Fall Cokriging (COK)

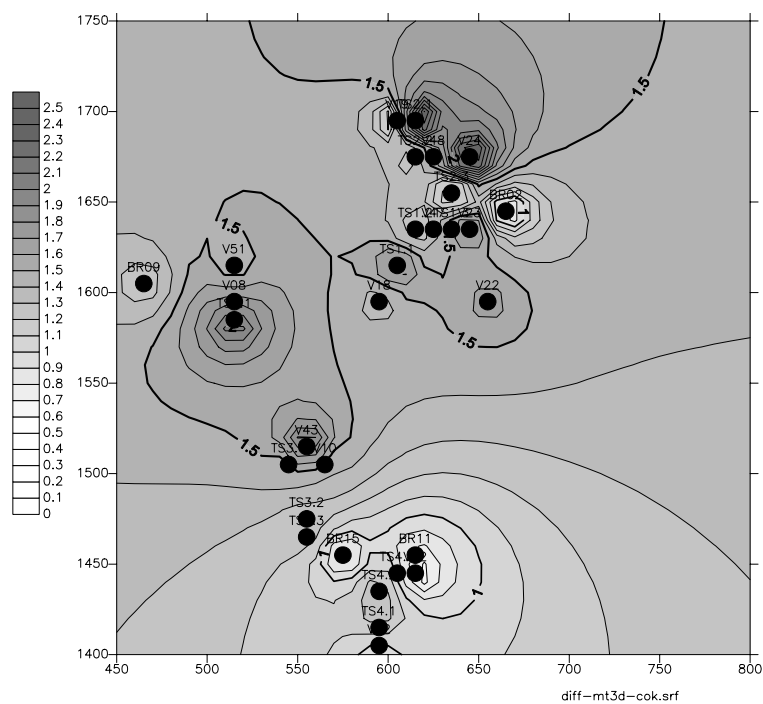


Abbildung B-29: Räumliche Verteilung der low-quartil-RMSE Werte im Fall COK (ZF-Typ IDI)

C

Ergebnisabbildungen zur Fallstudie 2

C.1 Beispiele für die Simulationen nach dem TURNING-BANDS Verfahren:

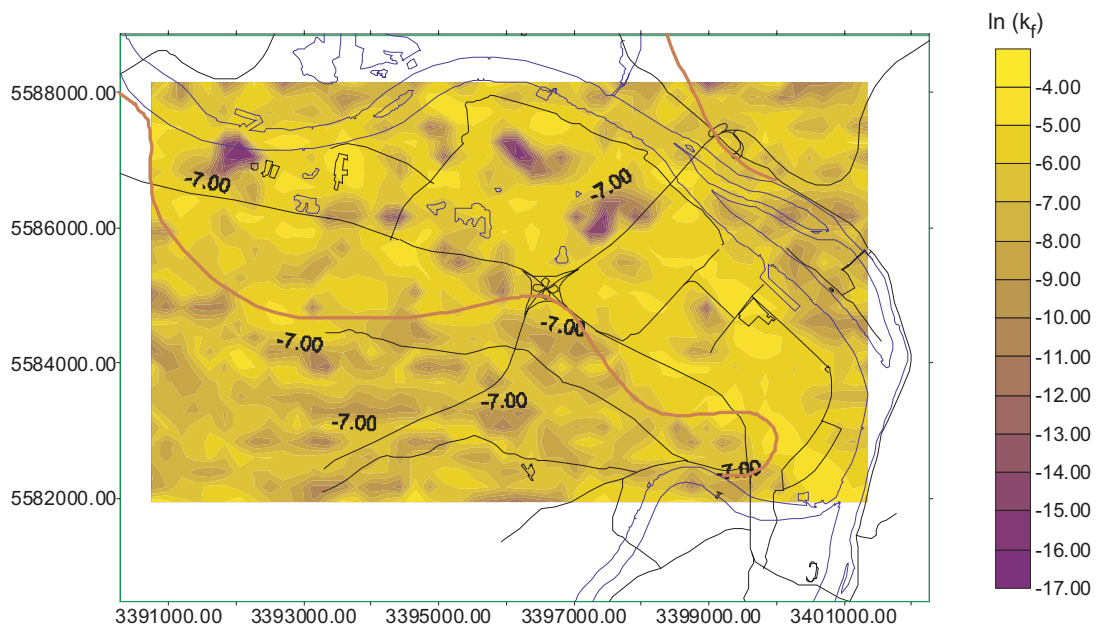


Abbildung C-1: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation
(Modellschicht 1, 62-66m+NN)

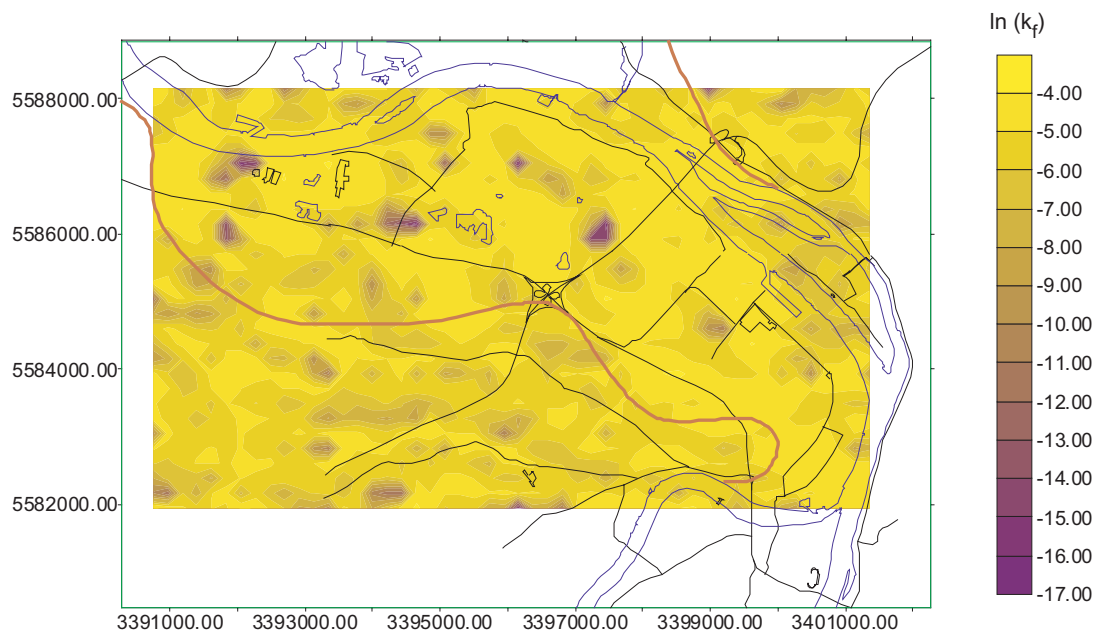


Abbildung C-2: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 2, 58-62m+NN)

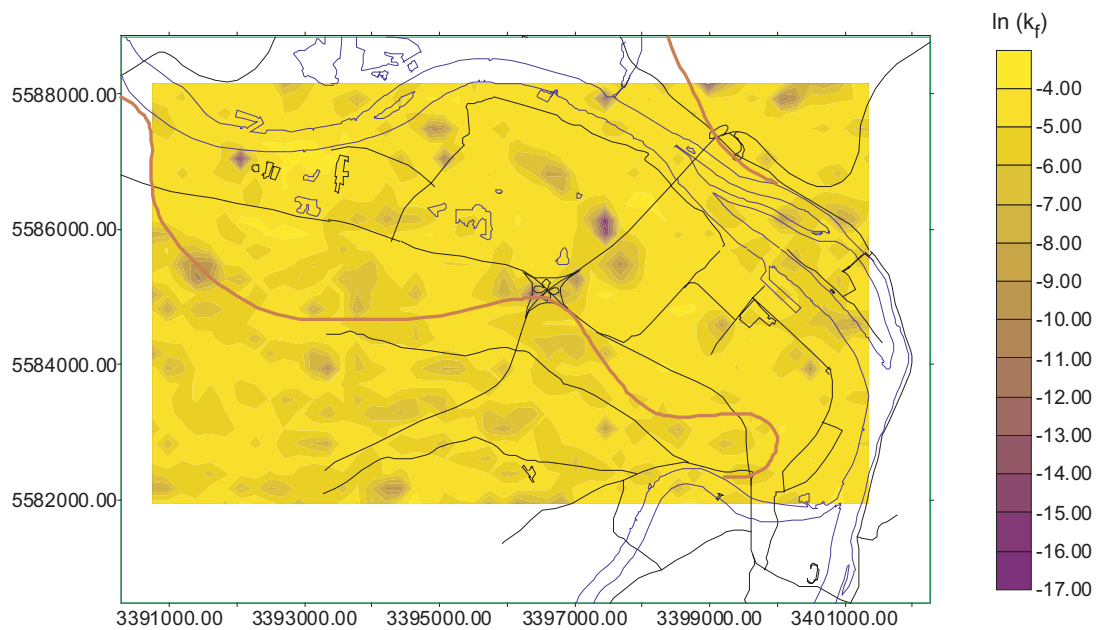


Abbildung C-3: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 3, 54-58m+NN)

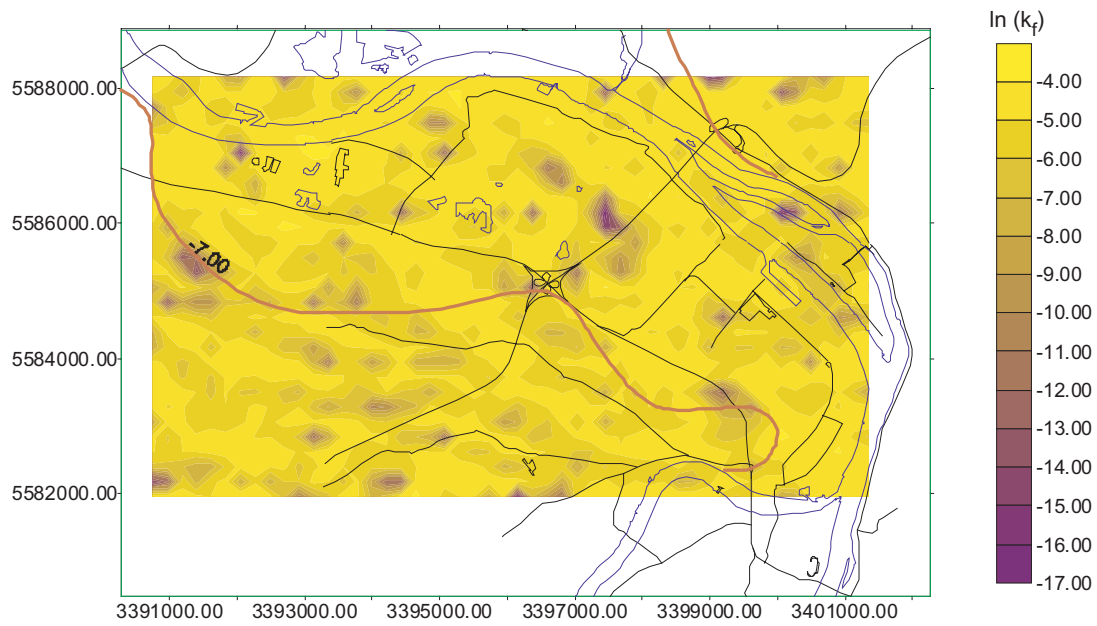


Abbildung C-4: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 4, 50-54m+NN)

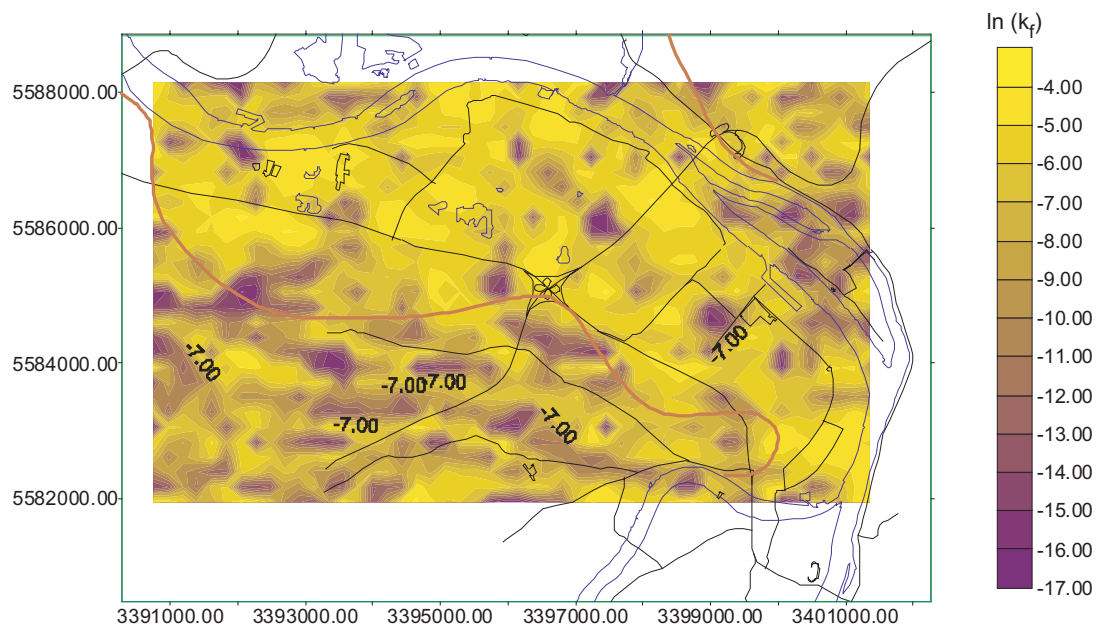


Abbildung C-5: Beispiel für eine konditionierte Turning-Bands Simulation (Modellschicht 5, 46-50m+NN)

C.2 Beispiele für die Simulationen nach dem Truncated GAUSS Verfahren:

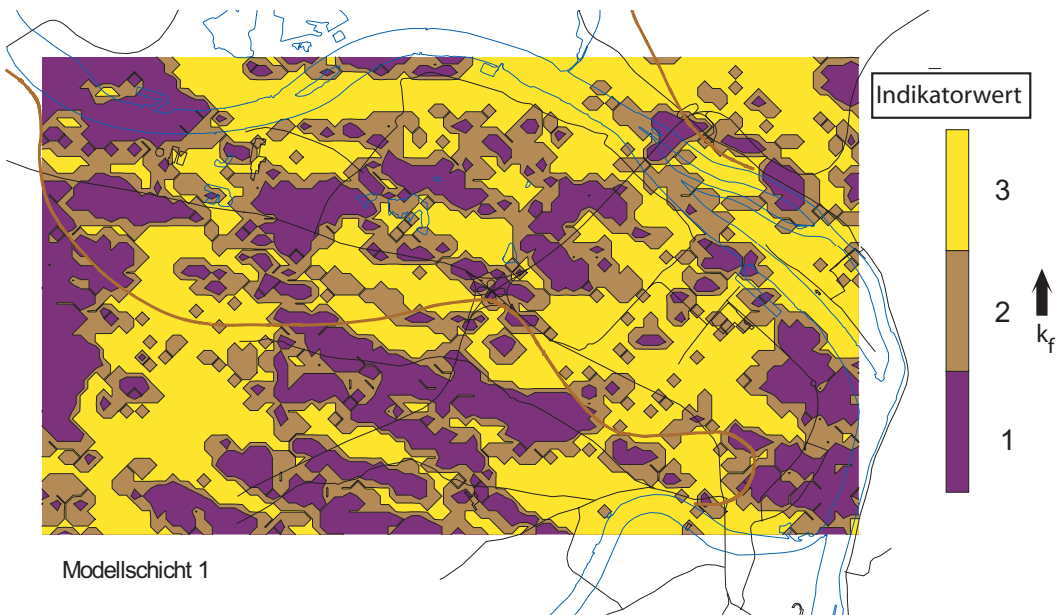


Abbildung C-6: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 1, 62-66m+NN)

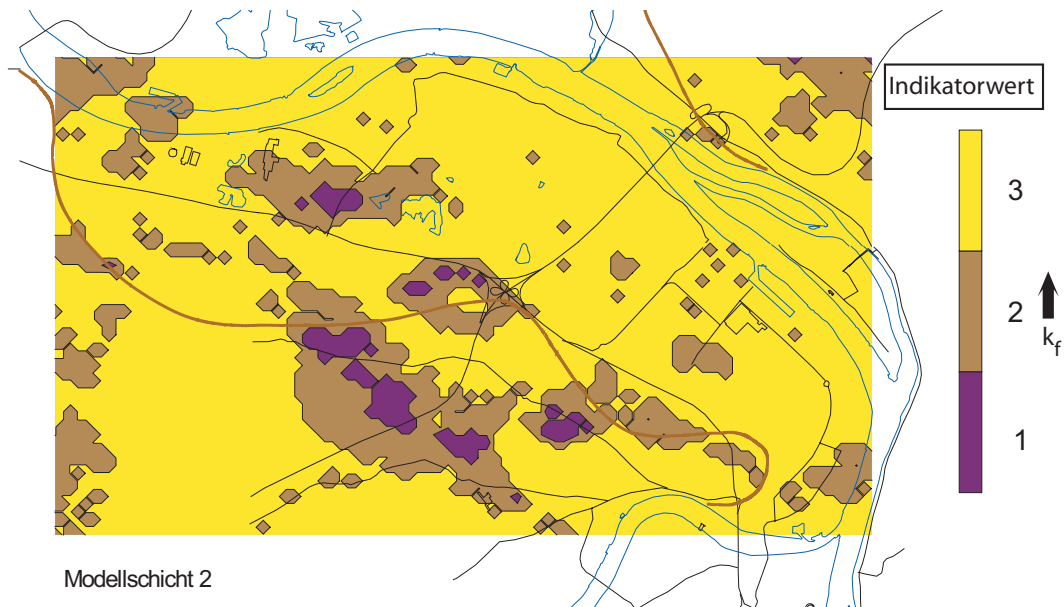


Abbildung C-7: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 2, 58-62m+NN)

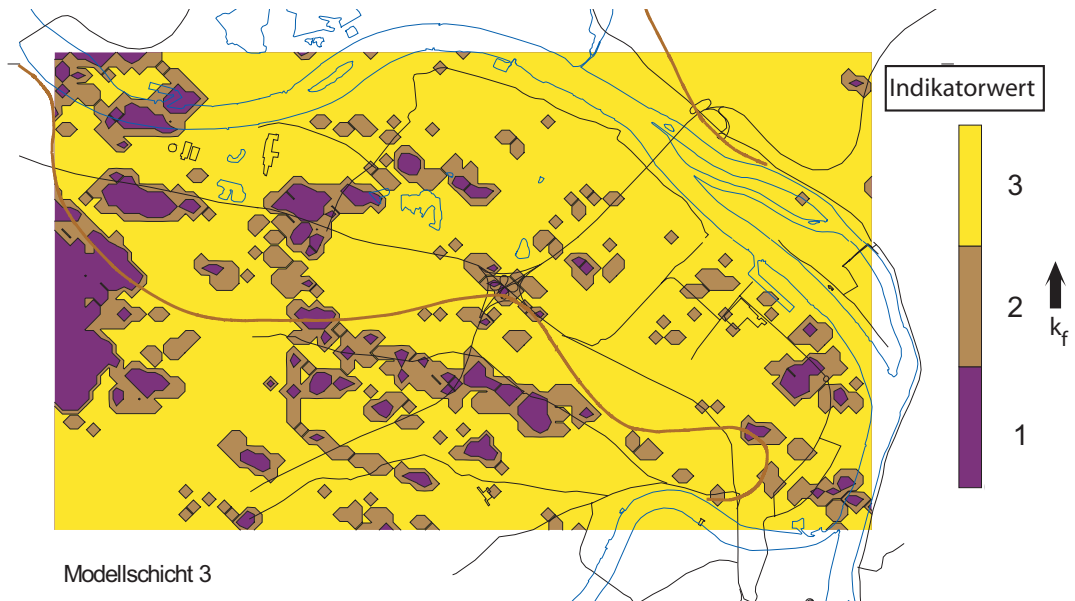


Abbildung C-8: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 3, 54-58m+NN)

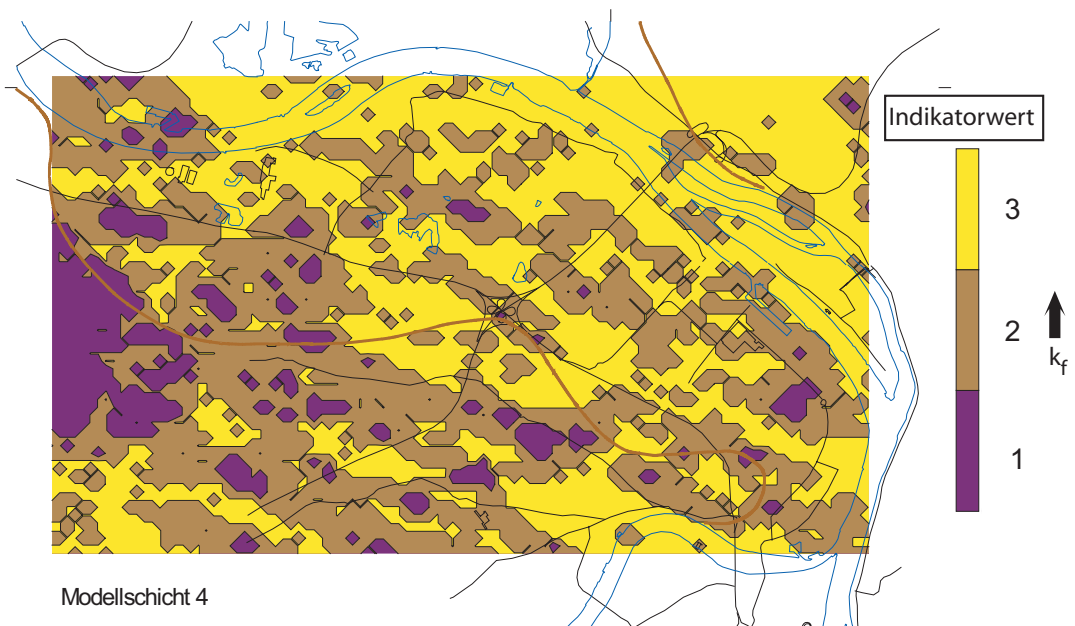


Abbildung C-9: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 4, 50-54m+NN)

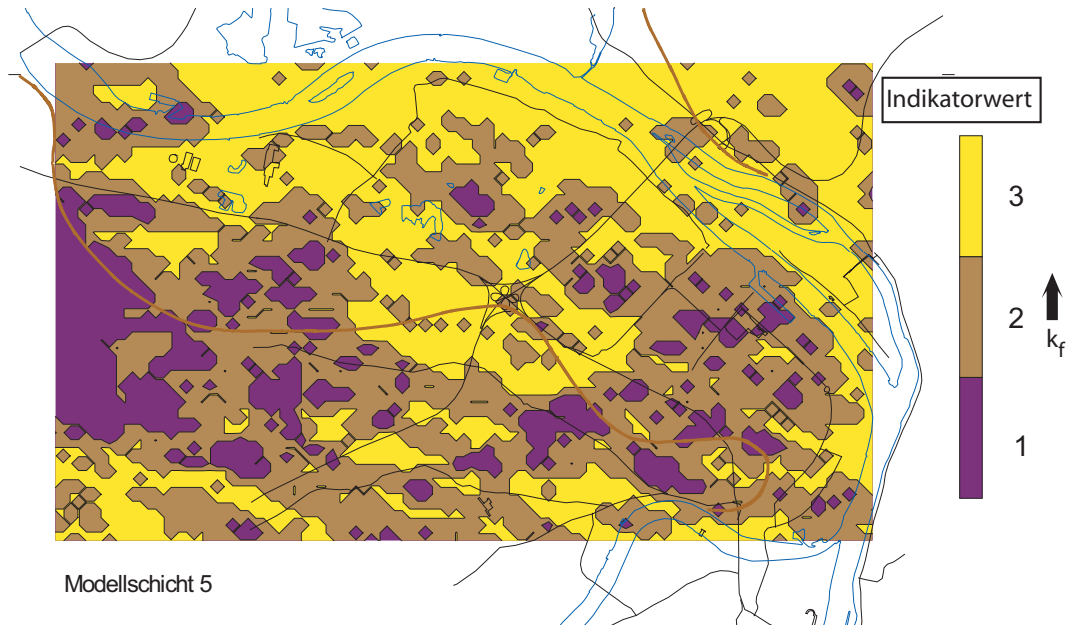


Abbildung C-10: Beispiel für eine konditionierte Truncated GAUSS Simulation (Modellschicht 5, 46-50m+NN)

C.3 Sequential Indicator Simulation und Simulated Annealing

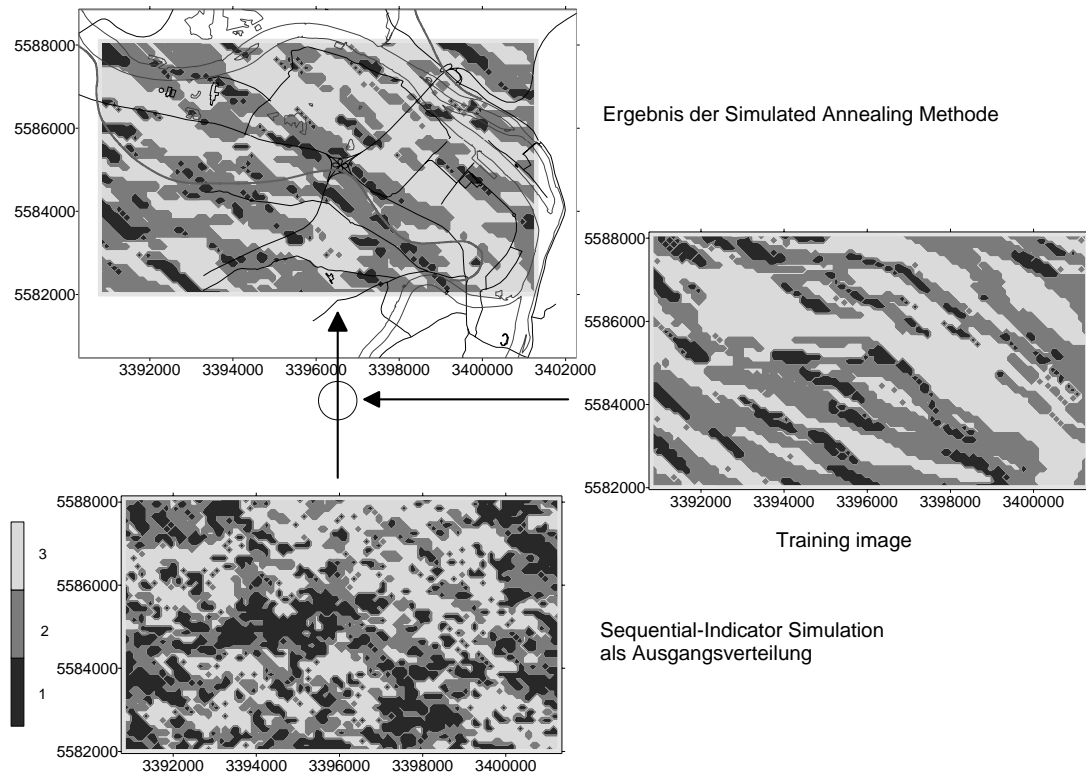


Abbildung C-11: Beispiel für die Anwendung des SA-Verfahrens als Postprozessor für SIS-Simulationen (Modellschicht 2, gleiches Trainingsimage für alle Schichten)

C.4 Manuelle Zonierung

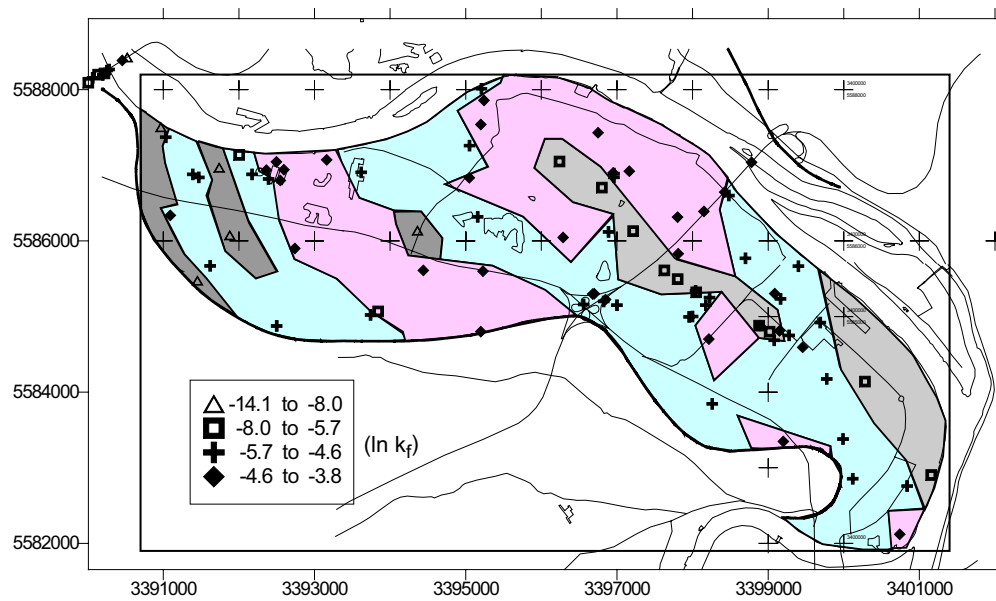


Abbildung C-12: Manuelle Abgrenzung der k_f -Bereiche bei TAE4 und MZ (Schicht 2, 58-62m+NN)

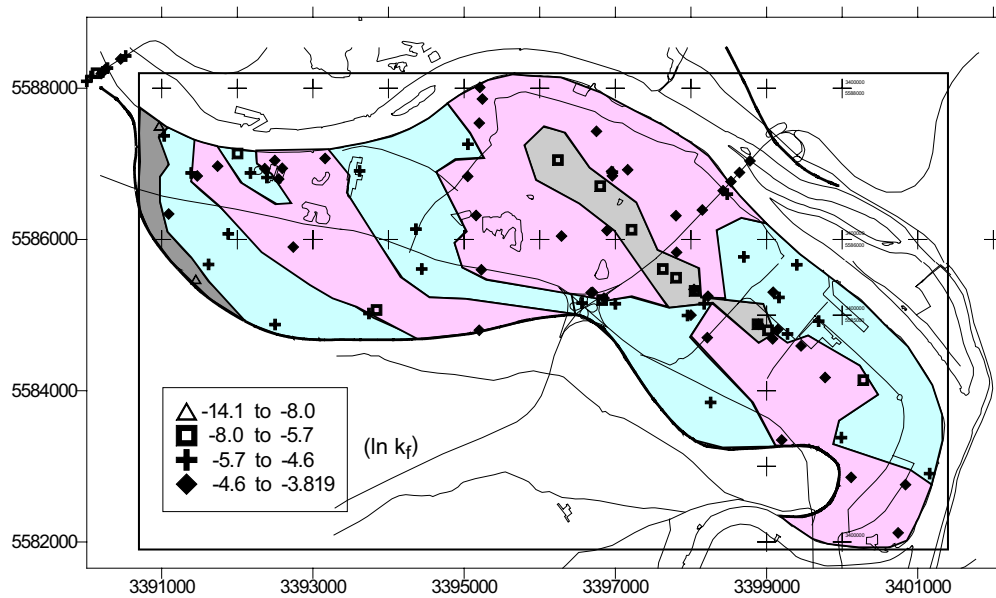


Abbildung C-13: Manuelle Abgrenzung der k_f -Bereiche bei TAE4 und MZ (Schicht 3, 54-58m+NN)

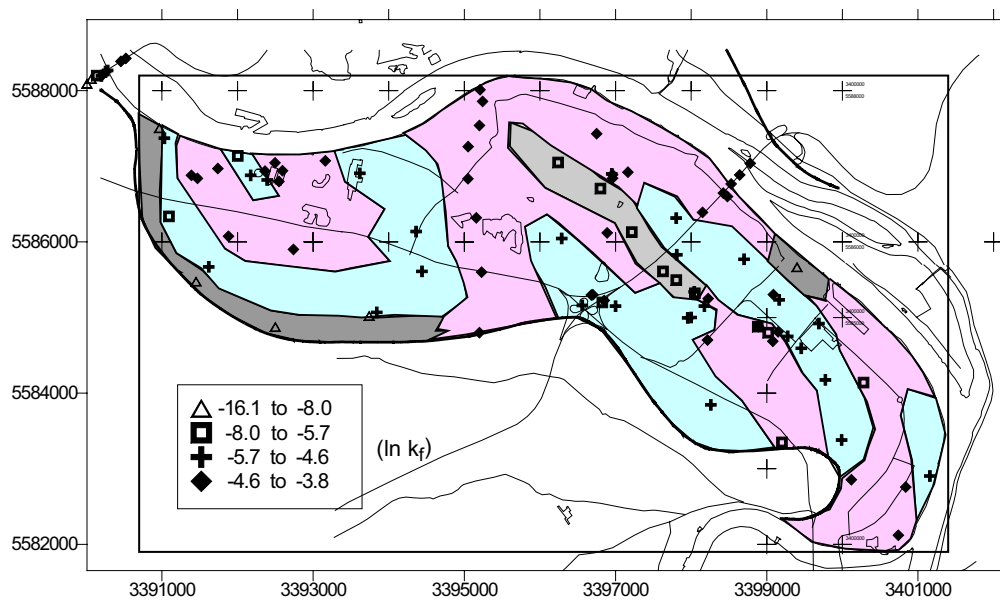


Abbildung C-14: Manuelle Abgrenzung der k_f -Bereiche bei TAE4 und MZ (Schicht 4, 50-54m+NN)

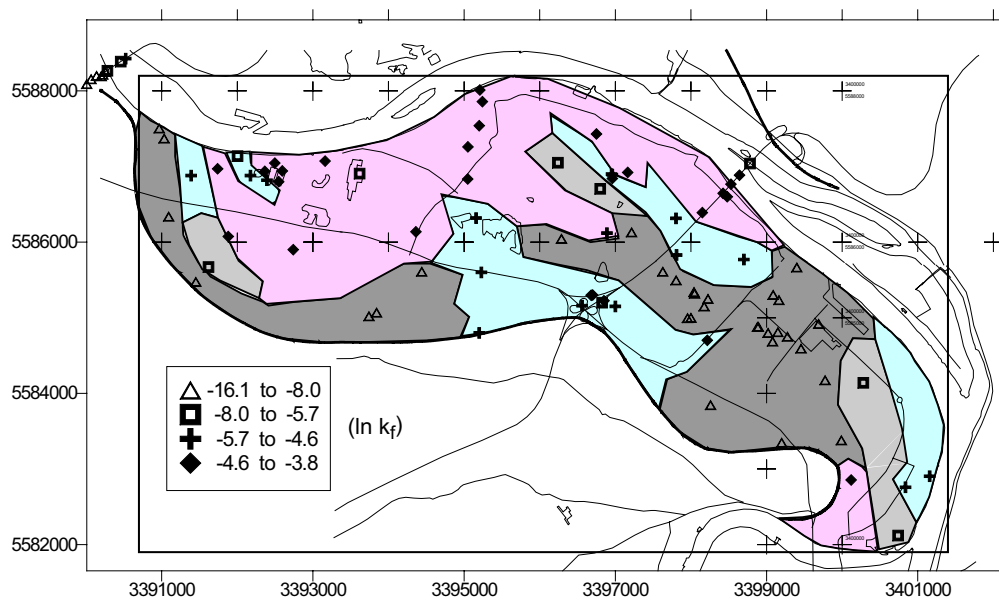


Abbildung C-15: Manuelle Abgrenzung der k_f -Bereiche bei TAE4 und MZ (Schicht 5, 46-50m+NN)

C.5 Ergebnisse der numerischen Modellierung

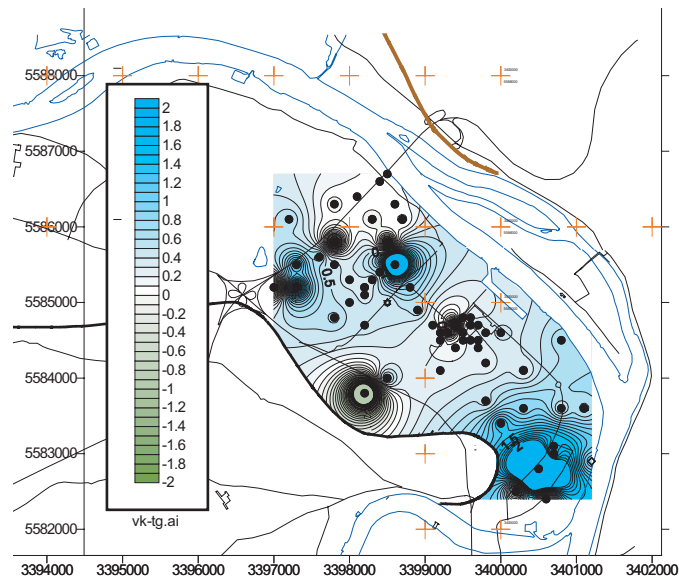


Abbildung C-16: Variationskoeffizient für Propagationspfad TG (ZF-Typ: DDI)

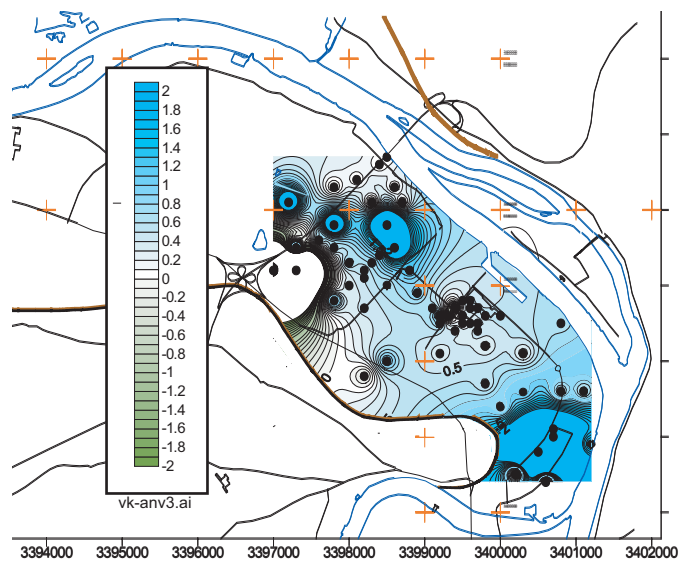


Abbildung C-17: Variationskoeffizient Propagationspfad SA (ZF-Typ: DDI)

D Definitionen

D.1 Das Zufallsmodell

Das Zufallsfeldmodell hat eine ganze Reihe von interessanten Eigenschaften, die in der Praxis vorteilhaft verwendet werden können. Ausführliche Beschreibungen hierzu geben z.B. JOURNEL & HUIJBREGTS (1978). Diese Eigenschaften bilden die Basis für die geostatistischen Methoden und sind deshalb hier noch einmal kurz zusammengefasst. Die Ensemble Variable ξ wird hier weggelassen.

1. Zufallsfelder (wie Zufallsvariable) werden durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) $f(z, \mathbf{x})$ beschrieben, die wiederum durch ihre statistischen Momente definiert ist. Die Definition des ersten Momentes oder Mittelwertes lautet:

$$E[Z(\mathbf{x})] = \int_{-\infty}^{\infty} z f(z, \mathbf{x}) dz \quad (\text{D.1})$$

und das k -te zentrale Moment, $k \in \{1, 2, \dots, \infty\}$

$$E[(Z(\mathbf{x}) - E[Z(\mathbf{x})])^k] = \int_{-\infty}^{\infty} (z - E[Z(\mathbf{x})])^k f(z, \mathbf{x}) dz \quad (\text{D.2})$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und ihre Momente sind also eine Funktion der Raumkoordinaten \mathbf{x} . Das zweite Moment ist die Varianz von $Z(\mathbf{x})$. Wenn $Z(\mathbf{x})$ normalverteilt ist, dann ist der Mittelwert und die Varianz ausreichend zur Beschreibung der gesamten Wahrscheinlichkeitsverteilung von Z an der Stelle \mathbf{x} .

2. Die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(z, \mathbf{x})$ und ihre Momente betreffen nur eine einzige Zufallsvariable: Z an einer bestimmten Stelle \mathbf{x} . Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung nennt man die *univariate* pdf. Ein Zufallsfeld jedoch charakterisiert eine räumliche Funktion und besteht daher aus einer unendlichen Anzahl von Zufallsvariablen: an jedem Punkt \mathbf{x} existiert eine andere Zufallsvariable. Deshalb werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen benötigt, die *multiple* Variablen des Zufallsfeldes charakterisieren. Z.B. ist die *bivariate* Wahrscheinlichkeitsdichte $f_2(z_1, z_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ definiert als:

$$\begin{aligned} f_2(z_1, z_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) dz_1, dz_2 = \\ \text{Prob}[(z_1 \leq Z(\mathbf{x}_1) < z_1 + dz) \text{ und} \\ (z_2 \leq Z(\mathbf{x}_2) < z_2 + dz_2)] \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Die bivariate Verteilung wird beschrieben durch die Mittelwerte von $Z(\mathbf{x}_1)$ und $Z(\mathbf{x}_2)$ und den folgenden Momenten $k, l \in \{1, 2, \dots, \infty\}$

$$E[(Z(\mathbf{x}_1) - E[Z(\mathbf{x}_1)])^k (Z(\mathbf{x}_2) - E[Z(\mathbf{x}_2)])^l] = \quad (\text{D.4})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (z_1(\mathbf{x}_1) - E[Z(\mathbf{x}_1)])^k (z_2(\mathbf{x}_2) - E[Z(\mathbf{x}_2)])^l f_{\gamma}(z_1, z_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) dz_1 dz_2$$

Für $k, l = 1$ vereinfacht sich Gleichung D.4 zum Ausdruck für die Kovarianzfunktion, die die Kovarianz zwischen den Zufallsfeldvariablen an den Punkten \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 beschreibt. Die univariate pdf gibt also Informationen über den Mittelwert, die Varianz, Schiefe, usw. der Variablen an jeder Stelle des Zufallsfeldes und die *bivariate* pdf gibt Informationen über die 2-Punkt Korrelationen der Zufallsfeldvariablen.

3. Ein Zufallsfeld ist *im engeren Sinne stationär*, wenn die multivariate Wahrscheinlichkeitsverteilung invariant gegen Translationen ist (n ist die Raumdimension):

$$f_n(z_1, z_2, \dots, z_n, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = f_n(z_1, z_2, \dots, z_n, \mathbf{x}_1 + \mathbf{v}, \mathbf{x}_2 + \mathbf{v}, \dots, \mathbf{x}_n + \mathbf{v}) \quad (\text{D.5})$$

für alle ($\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$) und für jeden Satz $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\} (n \in N)$

Für jede beliebige Anzahl von Punkten in jeder Konfiguration innerhalb des Zufallsfeldes bleibt auch nach einer Verschiebung der Konfiguration die multivariate pdf für den neuen Punktesatz die gleiche.

4. Diese sehr stringente Eigenschaft kann in vielen Anwendungen gelockert werden und stattdessen die sog. Stationarität zweiter Ordnung für das Modell der räumlichen Variation verwendet werden. Ein Zufallsfeld ist dann 2. Ordnung stationär, wenn die bivariate pdf sich gegenüber Translationen invariant darstellt:

$$f_2(z_1, z_2, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = f_2(z_1, z_2, \mathbf{x}_1 + \mathbf{v}, \mathbf{x}_2 + \mathbf{v}) \quad \forall (\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m) \quad (\text{D.6})$$

Die Stationarität zweiter Ordnung ist dann gegeben, wenn die ersten zwei Momente der bivariaten Gauss'schen pdf invariant gegenüber Translationen sind (zur Begründung s. z.B. BIERKENS, 1994):

$$E[Z(\mathbf{x})] = E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{v})] = \mu = \text{konst} \quad (\text{D.7})$$

$$E[Z(\mathbf{x}) - E[Z(\mathbf{x})]]^2 = E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{v}) - E[Z(\mathbf{x} + \mathbf{v})]]^2 = \sigma^2 = \text{konst} \quad (\text{D.8})$$

$$E[(Z(\mathbf{x}_1) - E[Z(\mathbf{x}_1)])(Z(\mathbf{x}_2) - E[Z(\mathbf{x}_2)])] = \quad (\text{D.9})$$

$$E[(Z(\mathbf{x}_1 + \mathbf{v}) - E[Z(\mathbf{x}_1 + \mathbf{v})])(Z(\mathbf{x}_2 + \mathbf{v}) - E[Z(\mathbf{x}_2 + \mathbf{v})])] =$$

$$C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = C(\mathbf{h}) \quad \forall \mathbf{v}, \mathbf{h} \in \mathbb{R}^m$$

wobei μ den Mittelwert und σ^2 die Varianz der *univariaten* pdf darstellt. Ein Zufallsfeld, das die Bedingungen der Gleichung D.7 bis Gleichung D.9 erfüllt, wird als im weiteren Sinne (w.S.) stationär (oder schwach 2. Ordnung stationär) bezeichnet. Ein im w.S. stationäres Zufallsfeld hat einen konstanten Mittelwert und konstante Varianz und eine Kovarianz, die nur eine Funktion des Abstandsvektors $\mathbf{h} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ ist. Zusammengefasst kann man feststellen, dass für ein Zufallsfeld mit *multivariater* Gauss-Verteilung und einer Stationarität im w.S., das komplette Zufallsfeld durch einen konstanten Mittelwert, eine konstante Varianz und durch eine Kovarianzfunktion, die nur eine Funktion der vektoriellen Differenz \mathbf{h} zwischen zwei Punkten des Zufallsfeldes ist, charakterisiert werden kann.

5. Die Kovarianz Funktion $C(\mathbf{h})$ ist eine wichtige Eigenschaft eines Zufallsfeldes. Für ein 2. Ordnung stationäres Zufallsfeld gilt:

$$C(0) = \sigma^2 \quad (\text{D.10})$$

und

$$\int_0^\infty C(h_x) dh_x = \sigma^2 \cdot I_x \quad (\text{D.11})$$

mit h_x als Punkteabstand in x-Richtung und I_x als linearer Integral-Skala in x-Richtung. Für die y- und z-Richtung gelten sinngemäß die gleichen Definitionen wie in Gleichung D.11. Die lineare Integral-Skala ist ein Maß für den Abstand bis zu dem Zufallsvariable an zwei Stellen des Zufallsfeldes noch korreliert sind.

6. Aus den Gleichungen D.10 und D.11 ist zu erkennen, dass im Falle der Stationarität 2. Ordnung, die Zufallsfelder eine endliche Varianz und eine endliche integrale Skala besitzen. Geophysikalische Variable können die Eigenschaft besitzen, dass die Varianz der Messungen anwächst, wenn die Untersuchungsfläche vergrößert wird. Dies kann einmal dadurch bedingt sein, dass die Integralskala der Variablen sehr groß ist im Vergleich zur Untersuchungsfläche oder die betrachtete Variable besitzt ein fraktales (selbstähnliches) Verhalten. In diesen Fällen können sowohl die Varianz wie auch die Integralskala unbeschränkt anwachsen. Hier wird dann oft ein Typ von Stationarität angenommen, der sogar noch weniger stringent ist als die Stationarität im weiteren Sinne: das Zufallsfeld ist dann *intrinsisch*. Dies bedeutet, dass die Differenzen $Z(\mathbf{x}_2) - Z(\mathbf{x}_1)$ als im w.S. stationär angenommen werden. Die Bedingungen für ein Zufallsfeld, das als intrinsisch bezeichnet werden kann sind damit folgende:

$$E[Z(\mathbf{x}_2) - Z(\mathbf{x}_1)] = 0 \quad (\text{D.12})$$

$$E[(Z(\mathbf{x}_2) - Z(\mathbf{x}_1))^2] = 2\gamma(\mathbf{h}) \quad (\text{D.13})$$

Die Differenz der Mittelwerte ist Null und die Varianz der Differenzen ist nur eine Funktion des Abstandsvektors \mathbf{h} . Die Funktion

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} E[(Z(\mathbf{x}_2) - Z(\mathbf{x}_1))^2] \quad (\text{D.14})$$

wird als Semivariogramm oder einfach Variogramm bezeichnet. Wenn ein Zufallsfeld im w.S. stationär ist, ist es gleichzeitig auch intrinsisch (aber nicht umgekehrt). Im Falle der Stationarität i.w. Sinne existiert folgende Beziehung zwischen der Kovarianzfunktion $C(\mathbf{h})$ und dem Variogramm ($\gamma(\mathbf{h})$):

$$\gamma(\mathbf{h}) = C(0) - C(\mathbf{h}) \quad \forall \mathbf{h} \in \mathcal{R}^m \quad (\text{D.15})$$

Ist das Zufallsfeld i.w.S. stationär, dann erreicht das Variogramm einen endlichen Wert, der als *sill* bezeichnet wird und σ^2 entspricht. Der Punkteabstandswert bei dem dieser konstante Wert erreicht wird, wird *Reichweite*³⁷ genannt. Die Reichweite repräsentiert die maximale Distanz über die zwei Punkte im Zufallsfeld korreliert bleiben. In der Nähe des Diagrammursprungs erreicht das Variogramm nicht immer den eigentlich zu erwartenden Wert 0 (vollständige Korrelation von Punkten mit einem Abstand nahe Null). Der hier auftretende Sprung wird *nugget* (-Effekt) genannt und gibt einen Hinweis auf unkorrelierte Variationen über kurze Distanzen. Abbildung D-1 zeigt eine Kovarianzfunktion und das entsprechende Variogramm mit einem Nuggetanteil. Fall (1) gilt für einen i.w.S. stationären Fall und (2) für ein intrinsisches Feld, das aber nicht i.w.S. stationär ist.

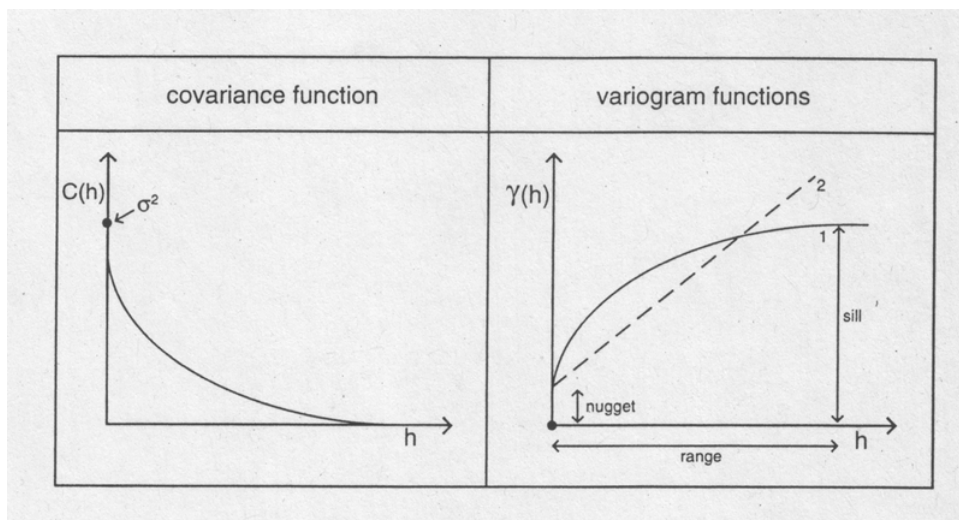


Abbildung D-1: Kovarianzfunktion und Variogrammbeispiel (Eine Kovarianzfunktion und das zugehörige Variogramm für ein i.w.S. stationäres Feld (1) und ein Variogramm für ein intrinsisches Zufallsfeld (2)). (aus BIERKENS, 1994).

7. Man spricht von einem *isotropen* Zufallsfeld, wenn die multivariate pdf invariant gegenüber einer Rotation ist. Die Kovarianz eines 2. Ordnung stationären Zufallsfeldes lautet dann:

37. eng. *range*

$$C(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = C(|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|) = C(|\mathbf{h}|) = C(h) \quad (\text{D.16})$$

Die Kovarianzfunktion hat also in allen Richtungen die gleiche Form.

8. Ein grundlegendes Problem des Zufallsfeldmodells ist, dass wir nur eine begrenzte Anzahl von Messungen aus einer Realisation (dem realen Zustand) besitzen. Gebraucht werden jedoch statistische Kenngrößen (Mittelwert, Varianz, pdfs) für das gesamte Ensemble von Realisationen. Es ist jedoch möglich, die relevanten statistischen Eigenschaften des Ensembles aus der einzigen Realisation zu ermitteln, wenn dieses Feld *ergodisch* ist. Da i.Allg. davon ausgegangen werden kann, dass geophysikalische Variable sich zeitunabhängig verhalten³⁸, ist nur eine Realisation vorhanden und man ist eigentlich immer gezwungen anzunehmen, dass das Zufallsfeld ergodisch ist. Im allgemeinen ist es nicht möglich die Ergodizität eines Zufallsfeldes nachzuweisen. Man kann jedoch davon ausgehen, dass bei einem i.w.S. stationären Zufallsfeld mit einer räumlichen Erstreckung, die mehreren Integralskalen entspricht, die aus der einzigen Realisation berechneten Kennwerte (Mittelwert, Kovarianzen) den Kennwerten des Zufallsfeldes entsprechen (BIERKENS, 1994).

D.2 Gauss'sche Modelle -- Effektive Parameter

Ausdrücke für die effektive hydraulische Durchlässigkeit, die aus der stochastischen Theorie abgeleitet werden setzen eine gleichförmige Strömung voraus. Die Verwendung eines effektiven Parameterwertes ist unter der Annahme möglich, dass es einen Wert für die hydraulische Durchlässigkeit gibt, der das mittlere Strömungsverhalten des betrachteten System reproduziert. Feldmessungen der effektiven hydraulischen Durchlässigkeit sind nur beschränkt möglich, andererseits können jedoch mittels numerischer Simulationen die entsprechenden Werte relativ einfach berechnet und mit den aus der Theorie erwarteten Werte verglichen werden (ANDERSON, 1997). GOMEZ-HERNANDEZ & GORELICK (1989) fanden, dass für einen heterogenen Aquifer mit einer ungleichmäßigen Berandung und mehreren Pumpbrunnen kein eindeutiger Wert für die effektive hydraulische Durchlässigkeit angegeben werden kann. Der hierfür ermittelte Wert verändert sich nämlich mit der Veränderung der Pumpraten oder der Platzierung der Brunnenstandorte.

Können hydraulische Durchlässigkeiten noch relativ einfach im Feld oder im Labor (unter Berücksichtigung der vielschichtigen Unsicherheiten) ermittelt werden, so ist dies für Dispersivitätswerte sehr viel schwieriger. Diese Messungen verlangen Tracer-Versuche, die evtl. über mehrere hundert Tage durchgeführt werden müssen und die Installation eines dreidimensionalen Netzes von Beobachtungsstellen. So erscheint die Möglichkeit sehr reizvoll, die Dispersivitäten aus analytischen

38. Die Theorie der stochastischen Prozesse ist eigentlich für zeitabhängige Zufallsgrößen entwickelt worden (s. z.B. LANGGUTH & VOIGT, 1980).

Ausdrücken abzuleiten, die Parameter verwenden, die wiederum auf geostatistischen Auswertungen der hydraulischen Durchlässigkeiten basieren, wobei jedoch der Umfang der hierfür notwendigen Datenerhebung erheblich ist (HESS et al., 1992). Für einen relativ homogenen Aquifer (Cape Cod, Massachusetts, USA) wurde von ihnen anhand von 1500 Messungen der hydraulischen Durchlässigkeit die statistischen Kennwerte berechnet. Die nach den Theorien von DAGAN (1988) und GELHAR & AXNESS (1983) berechneten Werte für die longitudinale Dispersivität stimmten gut mit denen überein, die aus einem Tracerversuch ermittelt wurden. Die berechneten transversalen Dispersivitäten waren dagegen zu klein, was auf Instationaritäten (zeitliche Variationen des hydraulischen Gradienten) im Strömungsfeld zurückgeführt wurde.

Gauss'sche Modelle verlangen, dass der $\ln k_f$ -Prozess statistisch homogen oder stationär ist. Dies bedeutet, dass die Variabilität unabhängig von ihrer räumlichen Lage zu sehen ist. Man kann annehmen, dass ein geologisches Medium auf einigen Skalenbereichen wirklich statistisch homogen ist, über alle Skalen gesehen ist dagegen mit Sicherheit die Stationaritätsannahme verfehlt. Selbst bei relativ homogenen Standorten wie dem *Borden* Testfeld, sprechen die Beobachtungen dafür, dass auf der für hydrogeologische Untersuchungen typischen Skala keine Stationarität gewährleistet ist (WOODBURY, 1991). Zunehmend werden deshalb andere Ansätze verfolgt, wie z.B. die fraktalen Modelle, die die sog. fortschreitende (*evolving*) Heterogenität reproduzieren können. Fraktale Modelle erlauben die Integration von verschachtelten (*nested*) Heterogenitätsskalen und von zeitabhängigen Dispersivitäten. Sowohl *Gauss'sche* als auch fraktale Modelle stoßen jedoch an ihre Grenzen bei der Behandlung von Aquiferen, die einen starken deterministischen Trend aufweisen.

D.3 Methoden der stochastischen Simulation

D.3.1 Turning-Bands

Das älteste Verfahren ist die von MATHERON (1973) entwickelte *Turning-Bands*-Methode. Es wurde erstmals von DELHOMME (1979) und MANTOGLOU & WILSON (1982) für hydrogeologische Fragestellungen eingesetzt. Die am weitesten verbreitete Umsetzung in eine Computer-Software stellt das Programm TUBA (ZIMMERMANN & WILSON, 1990) dar. Das Verfahren ist in folgende Schritte aufgeteilt:

- Es wird ein eindimensionales Feld (eine Linie) mit einer vorgegebenen Kovarianzfunktion und dem Mittelwert Null generiert.
- Diese Linie dient nun als Achse eines Zylinders im dreidimensionalen Raum. Jeder 'Schicht' (orthogonal zur Achse, mit der Dicke entsprechend dem Abstand zweier Punkte auf der Achse) des Zylinders wird der Wert des Parameters auf der Achse zugewiesen.
- N solcher Linien und Zylinder werden generiert, wobei der Winkel zwischen ihnen π / N beträgt.
- An jedem Punkt im Raum wird dann die Summe der N sukzessiven Werte berechnet, entsprechend der jeweiligen 'Schicht' jedes Zylinders in der der Punkt liegt. Die Summe wird dann noch durch $N^{1/2}$ dividiert.

D.3.2 Konditionierung bei Turning-Bands-Simulationen

Die Turning-Bands-Methode liefert eine unkonditionale, d.h. von den tatsächlichen Probenpunkten unabhängige Simulation der betrachteten Größe, die

1. dasselbe Histogramm

2. dasselbe Variogramm

wie die Ausgangsdaten aufweist.

Eine dritte Anforderung an eine solche Simulation ist, dass die simulierten Werte an den Probenpunkten an die tatsächlich gemessenen Werte treffen (bedingte oder konditionale Simulation). Dies kann mit dem Verfahren der Konditionierung erreicht werden:

Es gilt, dass ein wahrer Wert $z(x)$ gleich der Summe aus dem Krigingschätzer $z_k(x)$ plus einem unbekannten Krigingfehler ist:

$$z(x) = z_k(x) + [z(x) - z_k(x)] \quad (\text{D.17})$$

Da das Variogramm der unkonditioniert simulierten Werte gleich dem der Ausgangsdaten ist, gilt weiterhin, dass ein simulierter Wert $z_s(x)$ ebenfalls gleich der Summe seiner Krigingschätzung $z_{sk}(x)$ und einem Krigingfehler ist:

$$z_s(x) = z_{sk}(x) + [z_s(x) - z_{sk}(x)] \quad (\text{D.18})$$

In der konditionalen Simulation sucht man nun nach erfolgter unkonditionaler Simulation diejenigen simulierten Werte z_s heraus, die an den Originalprobenpunkten liegen, und führt eine Krigingschätzung durch. Der bis dahin unbekannte Krigingfehler entspricht dann der Differenz aus der Krigingschätzung z_{sk} und dem an diesem Ort x simulierten Wert z_s . Es gilt nun für den konditionierten Wert z_{sC} :

$$z_{sC}(x) = z_k(x) + [z_s(x) - z_{sk}(x)] \quad (\text{D.19})$$

Eine so durchgeführte Simulation liefert eine mögliche Realisation der Zufallsfunktion $Z(x)$, die

1. dasselbe Histogramm

2. dasselbe Variogramm

wie die Ausgangsdaten aufweist und

3. an den Probenpunkten mit den gemessenen Daten übereinstimmt.

Abbildung D-2 zeigt eine solche Realisation im Vergleich mit der 'Realität' und ihrer Krigingschätzung am Beispiel der Transmissivität entlang einer Profillinie.

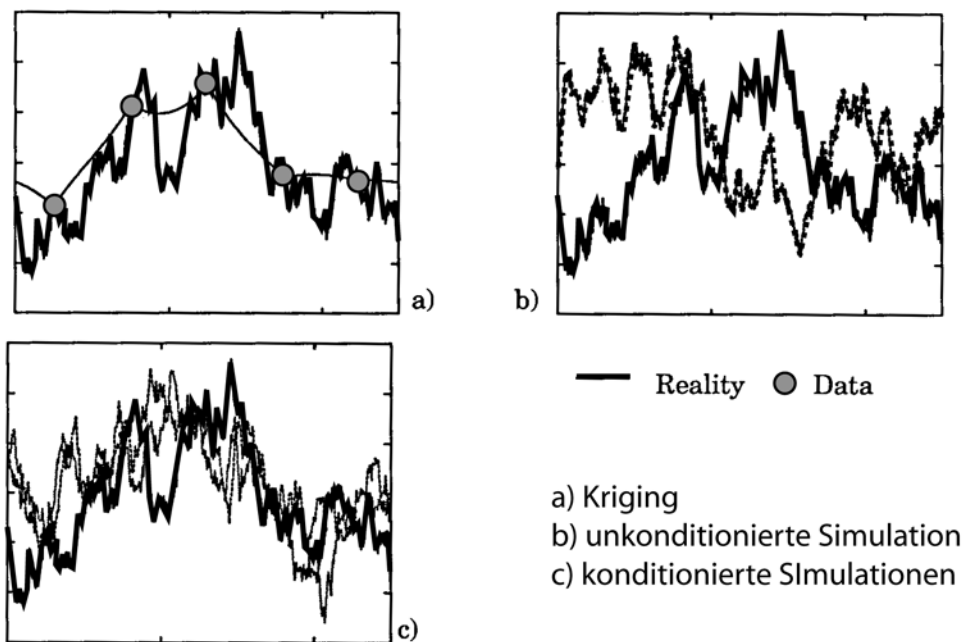


Abbildung D-2: Vergleich von Realität, Krigingschätzung und konditionaler Simulation (nach DE FOUQUET, 1994).

Praktische Durchführung: Die praktische Umsetzung wurde nach der bei DE FOUQUET (1994) beschriebenen Methode in 4 Schritten durchgeführt (s. Abbildung D-3):

1. unbedingte Simulation an den Gitterpunkten x_i und an den Datenpunkten x_a ,
2. an den Punkten x_a Berechnung der Differenz $y_a - s_a$,
3. Kriging an den Punkten x_i mit der Kovarianz K der Differenz $y_a(x_i) - s^*(x_i)$,
4. Summierung der unbedingten Simulation $s(x_i)$ mit dem Krigingergebnis der Differenz $(y^* - s^*)(x_i)$.

mit:

x_i	=	Punkte in einem Gitternetz
x_a	=	Punkte an denen 'Messwerte' vorliegen
y_a	=	'Messwerte' an den Punkten x_a
s_a	=	Ergebniswerte der unbedingten Simulation an den Datenpunkten x_a
y^*	=	'gekrigte Messwerte' an den Gitterpunkten x_i
s^*	=	Ergebniswerte der unbedingten Simulation an den Gitterpunkten x_i

Vereinfachend wurde in den beiden behandelten Beispielfällen statt der Differenz $y_a - s_a$ die Differenz $y_a - s_a^*$ gebildet (mit s_a^* als Ergebnis der unbedingten Simulation an einem dem Datenpunkt x_a nächstgelegenen Gitterpunkt, s. Abbildung D-4).

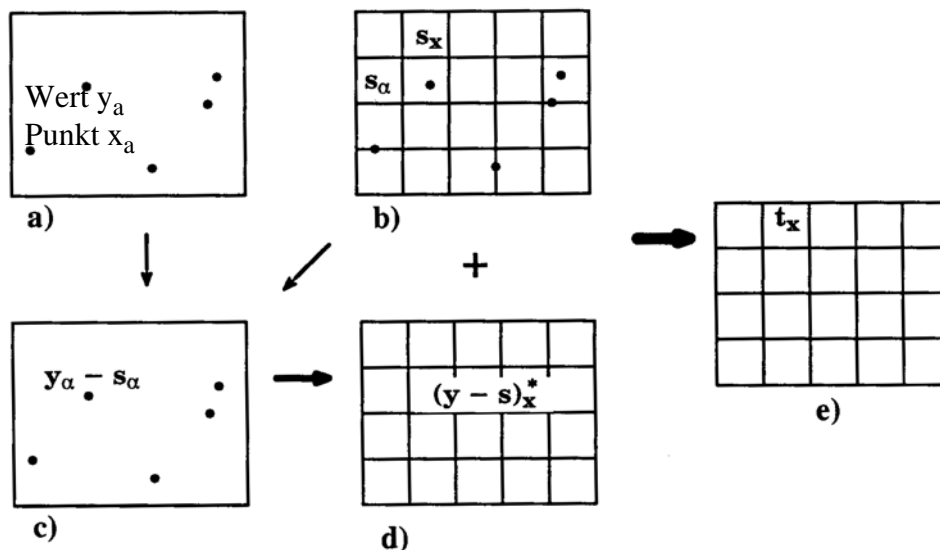


Abbildung D-3: Schritte bei der Erstellung einer konditionalen Simulation (nach DE FOUQUET, 1994)

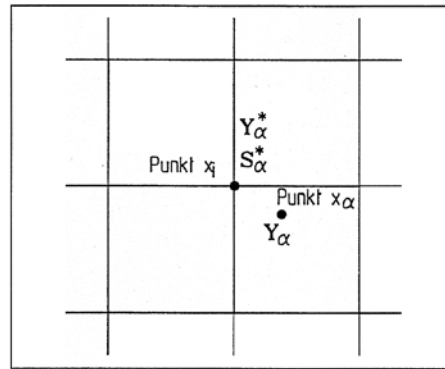


Abbildung D-4: Vereinfachung der Differenzenbildung bei der Konditionierung nach FOUQUET.

D.3.3 Sequential Indicator Simulation

Die Indikator-Statistik im allgemeinen betrachtet mehr die Rangfolge der zu simulierenden Variablen, als die tatsächlichen Werte selbst. Dazu wird eine binäre Transformation vorgenommen:

$$I(u, z_c) = 1, \text{ wenn } Z(u) \leq z_c \text{ oder } 0, \text{ wenn } Z(u) > z_c \quad (\text{D.20})$$

mit z_c als Schwellenwert, $I(u; z_c)$ ist der Indikatorwert und $Z(u)$ die Zufallsvariable (z.B. der k_f - Wert). Unter Verwendung von L Schwellenwerten z_{ck} , ($k=1, \dots, L$) kann der gesamte Wertebereich von $Z(u)$ in $L+1$ Klassen eingeteilt werden. Ein Vorteil des Indikatorprinzips ist, dass alle verfügbaren Daten (*hard* und *soft data*) gleichermaßen als Indikatorwerte codiert werden können. 'Harte' Daten zeichnen sich durch einen kompletten Vektor von Nullen und Einsen (wenn nur ein Schwellenwert verwendet wird) aus. Der Vektor für die 'weichen' Daten, die eher ein Werteintervall repräsentieren, ist dagegen unvollständig (s. Abbildung D-5).

Bei der *Sequential Indicator Simulation* (SIS) werden die Knoten im Simulationsbereich sequentiell belegt. Die (*posterior*-) kumulative Verteilung für die belegten Punkte (u) wird mit Hilfe von Indikator-Kriging berechnet. Vorher wurden die Punkte bereits mit den vorab bekannten Indikator-Daten für jeden Schwellenwert konditioniert. Die Konditionierung wird so gestaltet, dass alle Daten in der Nachbarschaft von (u) einschließlich der Originaldaten und aller bis zu diesem Zeitpunkt simulierten Werte einbezogen werden.

Ein Wert $Z(u)$ wird am Punkt (u) dann zufällig aus dieser Verteilung gezogen unter der Bedingung, dass an Punkten, an denen Originaldaten vorhanden sind, diese unverändert bleiben und zum Satz der bereits simulierten Werte hinzugefügt werden (s. a. GOMEZ-HERNANDEZ & JOURNAL, 1992). Als größte Vorteile dieses Verfahrens sind die sehr einfache Möglichkeit der Integration von nicht exakt bekannten Daten und die Berücksichtigung des Indikator-Variogramms durch das Kriging-System zu nennen.

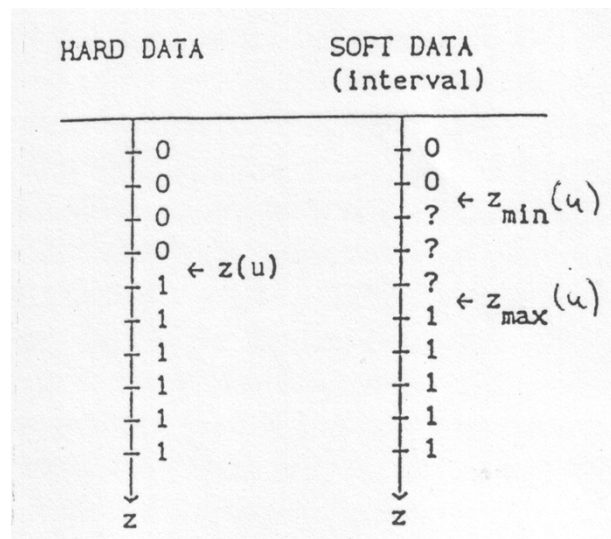


Abbildung D-5: Indicator Codierung von 'harten' Daten und 'weichen' Intervall-Daten

Das für die Berechnungen verwendete Programm SISIMPDF (DEUTSCH & JOURNEL, 1992) gewinnt auch die benötigten Verteilungsfunktionen direkt durch Indikatorkriging.

D.3.4 Truncated Gauss Simulation

Gibt es nur zwei Kategorien für die Indikatorvariable ($k=2$) und eine ist komplementär zur anderen, kann man unbedingte Realisationen der eindeutigen Indikatorvariable $I(u)$ durch Stutzen der kontinuierlichen Realisationen $\{y^{(1)}(u), u \in \mathfrak{R}\}$ einer Gauss'schen Zufallsfunktion $Y(u)$ erreichen. Dann ist:

$$\begin{aligned} i^{(1)}(u) &= 1, \text{ wenn } (y^{(1)} \leq y_p) \\ &= 0, \text{ sonst} \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

mit $y_p = G^{-1}(p)$ als Standard Normal p -Quantile und p als gewünschte Anteile der Indikatoren, die zusammen eins ergeben:

$$E[I(u)] = p \quad (\text{D.22})$$

Die Serie von Schwellenwerten, die die verschiedenen Kategorien definieren, können räumlich variabel festgelegt werden. Dies erlaubt es, die Anteile jeder Kategorie z.B. für einzelne Schichten getrennt anzugeben.

Als Nachteil der Methode kann man ansehen, dass die räumliche Sequenz der simulierten Kategorien fest ist. So kann man z.B. in jeder Richtung die Abfolge der Kategorien C_1, C_2, C_3, C_4 , oder C_4, C_3, C_2, C_1 finden. Der Algorithmus erlaubt es nicht, diskontinuierliche Sequenzen wie C_1, C_4, C_3, C_2 zu generieren. Für die Simulation muss also von einer natürlichen Reihenfolge der Variablen ausgegangen werden.

D.3.5 Simulated Annealing

Die nachstehenden Ausführungen orientieren sich vor allem an DEUTSCH & COCKERHAM (1994). Beim Annealing-Ansatz zur stochastischen Simulation gibt es kein explizites Zufallsfunktionsmodell. Vielmehr wird die Erzeugung einer Realisation als ein Optimierungsproblem formuliert. Dieses wird mit einer numerischen Optimierungstechnik gelöst. Die erste Anforderung dieser Klasse von Methoden ist eine Zielfunktion (oder auch Energiefunktion), welche ein ungefähres Maß darstellt für die gewünschten räumlichen Charakteristiken. Die globale Optimierungstechnik, die am meisten verwendet wird, um derartige Realisationen zu erhalten, basiert auf einer Analogie zum physikalischen Prozess des Verschmelzens (*annealing*). *Annealing* ist der Prozess bei dem das Material einer starken Erwärmung ausgesetzt und dann langsam abgekühlt wird. Wärmeschwingungen erzeugen eine Strukturveränderung des Gefüges in Richtung eines stärker strukturierten Gitters, d.h. zu einem niedrigeren energetischen Zustand. Im Zusammenhang mit einer numerischen 3-D-Modellierung, kann der *Annealing*-Prozess durch die folgenden Schritte simuliert werden:

- Ein Anfangsmodell (analog zu der Anfangsschmelze beim wirklichen *Annealing*) wird erzeugt durch Belegung der Modellnetzknotten mit Zufallswerten, die aus der gewünschten räumlichen Verteilung gezogen werden. Diese anfängliche räumliche Verteilung kann so konstruiert werden, dass hier bereits zusätzliche räumliche Eigenschaften (z.B. großräumige deterministische Strukturen) der gewünschten Verteilung enthalten sein können.
- Eine Energiefunktion (analog zur *Gibb's* freien Energie im wirklichen *Annealing*) wird definiert als Maß der Differenz zwischen den gewünschten räumlichen Eigenschaften und denen der generierten Realisation. Beispielsweise kann als Zielfunktion die quadrierte Differenz zwischen dem Semi-Variogramm der Realisation und dem des Modells definiert werden.
- Das erzeugte Bild wird 'gestört', indem Wertepaare an zufällig gewählten Netzknotten vertauscht werden. Dies stellt eine Nachahmung der Wärmeschwingungen beim wahren *Annealing* dar.
- Diese Störung wird akzeptiert, wenn die Energie verringert wird; mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit wird sie auch dann akzeptiert, wenn dabei der Energiezustand erhöht wird (dies entspricht der Boltzmann Wahrscheinlichkeit beim wirklichen *Annealing*).
- Die Störungsprozedur wird fortgesetzt, bis ein niedrigerer Energiezustand erreicht ist. Hierbei wird die Wahrscheinlichkeit für die Akzeptanz 'ungünstiger' Tauschvorgänge dauernd herabgesetzt. Der niedrigste Energiezustand soll einer plausiblen Realisation des tatsächlich zu modellierenden Gebietes entsprechen

In dieser Arbeit wird Simulated Annealing als Postprozessor für vorhandene Simulationen, die bereits viele der verlangten räumlichen Eigenheiten besitzen, eingesetzt. Die Ausgangssimulation wird von dem Programm SISIMPDF erzeugt, die verwendete Zielfunktion fügt zusätzliche Strukturen, die in einem sogenannten 'Trainings-Bild' festgelegt sind, hinzu. Die Zielfunktion verwendet ein 2-Punkt Histogramm der definierten Indikator Variablen.

Sei Z eine Zufallsvariable, die eine von K Werten annehmen kann ($k=1,...,K$), dann ist das 2-Punkt Histogramm für einen speziellen Abstandsvektor h der Satz aller bivariaten Verschiebungswahrscheinlichkeiten:

$$p_{k,k'} = \text{Prob} \{Z(u) \in \text{Kategorie } k \text{ bzw. } Z(u + \mathbf{h}) \in \text{Kategorie } k'\} \quad (\text{D.23})$$

unabhängig von u , für alle $k,k' = 1,...,K$. Die zugehörige Zielfunktion lautet:

$$O = \sum_{\mathbf{h}} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{k'=1}^K [p^{\text{Training}}_{k,k'}(\mathbf{h}) - p^{\text{Realisation}}_{k,k'}(\mathbf{h})]^2 \right) \quad (\text{D.24})$$

wobei $p^{\text{Training}}_{k,k'}(\mathbf{h})$ die Referenz Wahrscheinlichkeiten darstellen, die direkt vom Trainingsbild ermittelt werden und $p^{\text{Realisation}}_{k,k'}(\mathbf{h})$ die zugehörigen Häufigkeiten der generierten Simulation darstellen.

Als Hauptvorteil von *Simulated Annealing* kann man die Fähigkeit des Verfahrens ansehen, viele verschiedene Datenquellen integrieren zu können. Dem steht aber entgegen, dass bei vollständiger Ausnutzung dieser Fähigkeiten die notwendigen CPU-Zeiten über jedes praktisch vertretbare Zeitmaß hinausgehen. Deshalb muss die Zielfunktion so einfach wie möglich gehalten werden. Eine wichtige Frage betrifft den Zeitpunkt zur Änderung der Temperatur. Folgendes empirisches Verfahren hat sich hierfür bewährt: Der Anfangswert der Zielfunktion wird auf den Wert 1 skaliert, so dass ein dimensionsloser *annealing schedule* verwendet werden kann. Das Konzept ist, dass mit einer hohen Anfangstemperatur t_0 gestartet wird und diese dann mit einem Multiplikationsfaktor λ immer dann verringert wird, wenn genug Tauschvorgänge akzeptiert worden sind ($K_{\text{accept}} \cdot n_{\text{nodes}}$), oder zu viele Versuche gestartet worden sind ($K_{\text{max}} \cdot n_{\text{nodes}}$). Der Algorithmus wird gestoppt, wenn die Bemühungen zur Verringerung der Zielfunktion nicht mehr erfolgreich sind, d.h. wenn K_{max} eine gewisse Anzahl S überschritten hat oder die Zielfunktion einen niedrigen Wert O_{min} erreicht hat.

Konditionieren auf lokale Daten

Ein einfacher Weg lokale Daten (Messwerte) in den Realisationen zu berücksichtigen ist der, die Daten aus dem Austauschprozess auszuschließen. Dieses Vorgehen verursacht jedoch Diskontinuitäten in der Nähe der Konditionierungsdaten. Dies geschieht, weil die Konditionierungsdaten, die keine Chance haben ausgetauscht zu werden, nicht in gleichem Maße zur globalen Zielfunktion beitragen wie die übrigen Daten. DEUTSCH & JOURNAL (1992) schlagen zur Korrektur der Zielfunktion ein *splitting* in zwei Teile vor:

$$O = \sum_{l=1}^{n_l} \{ [\gamma_S(\mathbf{h}_l) - \gamma_{\text{model}}(\mathbf{h}_l)]^2 + [\gamma_c(\mathbf{h}_l) - \gamma_{\text{model}}(\mathbf{h}_l)]^2 \} \quad (\text{D.25})$$

mit n_1 als Anzahl der Distanzklassen in der Zielfunktion, $\gamma_{model}(\mathbf{h}_1)$ ist das Modell Semi-Variogramm und $\gamma_S(\mathbf{h}_1)$ bzw. $\gamma_C(\mathbf{h}_1)$ sind die Semivariogramme der Realisationen. Der Index S bezeichnet dabei Datenpaare, deren beide Endpunkte simulierte Knoten darstellen, während der Index C Datenpaare kennzeichnet, wo wenigstens ein Endpunkt einen Konditionierungswert darstellt. Dieser Ansatz beschränkt jedoch die Ergebnisse stark in der Nähe der Konditionierungsdaten.

Ein erfolgversprechenderer Ansatz hat folgende Form einer einteiligen Zielfunktion:

$$O = \sum_{l=1}^{n_1} [\gamma(\mathbf{h}_l) - \gamma_{model}(\mathbf{h}_l)]^2 \quad (\text{D.26})$$

Hierbei werden die Paare, die zu dem semi-Variogramm Wert $\gamma(\mathbf{h}_l)$ beitragen, gewichtet je nachdem, ob Konditionierungsdaten im jeweiligen Wertepaar enthalten sind oder nicht. Das Semivariogramm wird berechnet nach:

$$\gamma(\mathbf{h}_l) = \frac{\sum_{i=1}^i w_l \cdot [z(\mathbf{u}_i) - z(\mathbf{u}_i + \mathbf{h}_l)]^2}{2 \cdot \sum_{i=1}^{n_1} w_l} \quad (\text{D.27})$$

Dann ist $w_l = 1.0$, wenn sowohl $z(\mathbf{u}_i)$ als auch $z(\mathbf{u}_i + \mathbf{h}_l)$ simulierte Knoten sind. Gehört einer von beiden Werten zu den Konditionierungsdaten dann ist $w_l > 1$.

DEUTSCH & COCKERHAM (1994) fanden hierfür einen Wert von $w_l \approx 15$ als geeignet.

Zielfunktionen mit gewichteten Komponenten

Im allgemeinen wird die Zielfunktion O aus der gewichteten Summe von C Komponenten gebildet:

$$O = \sum_{c=1}^C w_c \cdot O_c \quad (\text{D.28})$$

wobei w_c und O_c die Komponenten der Gewichte und Zielfunktionen darstellen. Die Komponenten der Zielfunktion geben an, wie sicher Eigenschaften des simulierten Bildes von den gewünschten Kontroll- oder Referenzeigenschaften abweichen. Zum Beispiel: eine Komponente könnte das Maß für die Differenz zwischen einem Variogramm-Modell und dem Variogramm der Realisation darstellen, eine zweite Komponente kann den Grad der Wiedergabe von spezifischen kleinskaligen räumlichen Eigenschaften, die durch eine spezielle 4-Punkt- (quadrivariate) Statistik beschrieben wird, beinhalten. Zusätzlich kann eine dritte Komponente die Übereinstimmung mit einem zweiten Attribut durch die Berechnung eines Korrelationskoeffizienten quantifizieren.

Alle Entscheidungen über die Annahme oder Verwerfung eines Austauschvorganges basieren auf der Änderung der Zielfunktion

$$\Delta O = \sum_{c=1}^C w_c [O_{neu} - O_{alt}] = \sum_{c=1}^C w_c \Delta O_c \quad (\text{D.29})$$

Die Gewichte w_c , $c=1, \dots, C$ werden so gewählt, dass im Mittel jede Komponente mit gleichen Anteilen zu der Änderung der Zielfunktion ΔO beiträgt. Das heißt, jedes Gewicht w_c ist invers proportional zur mittleren Veränderung der zugehörigen Zielfunktionskomponente

$$w_c = \frac{1}{|\Delta O_c|}, c = 1, \dots, C \quad (\text{D.30})$$

Daneben sind möglich: (a) ungleich gewichtete Komponenten, wenn diese differierende Wichtigkeiten für die Zielfunktion besitzen, (b) Veränderung der Gewichte im Verlaufe der Optimierungsroutine.

D.4 Stichprobenauswahl bei Monte Carlo Simulationen

Ein wichtiges Merkmal der Monte Carlo Simulationen (MCS) ist der Zwang zur Auswahl von Stichproben aus einer Grundgesamtheit.

D.4.1 Zufallsstichproben:

Das einfachste Problem ist es, Stichproben für einen Parameter mit gegebener Wahrscheinlichkeitsverteilung (pdf) zu ziehen. Schritt (1) ist die Erzeugung von Zufallszahlen r im Intervall $[0,1]$. Schritt (2) umfasst die Anpassung der Zufallszahlen an die pdf des gegebenen Parameters p . Wenn z.B. p eine Normalverteilung besitzt (mit Mittelwert m und Varianz σ^2), dann ist es das einfachste Verfahren N Werte von $[r - 0.5]$ aufzuaddieren (z.B. $N=12$). Wegen des Zentralen Grenzwert Theorems hat diese neue Zahl etwa eine Normalverteilung mit dem Mittelwert 0 und der Varianz 1. Durch Multiplizieren mit σ^2 und Addition von m erhält man eine Normalverteilung mit dem Mittel m und der Varianz σ^2 . Wenn für mehrere unabhängige Parameter Stichproben für einen Monte Carlo Lauf gezogen werden müssen, wird diese Prozedur für jeden Parameter wiederholt.

D.4.2 Stratifizierte Stichprobenauswahl:

Dies ist eine Methode die Stichprobenwahl so zu beeinflussen, dass Zahlen aus der gesamten Spannweite der Variation eines Parameters gezogen werden und darüberhinaus die Gesamtzahl der Monte Carlo Läufe reduziert wird. Bei einer rein zufälligen Stichprobenauswahl und einer großen Anzahl von unabhängigen Variablen ist es nämlich eher unwahrscheinlich, dass mehrere Parameter in einem Monte-Carlo Lauf Werte annehmen werden, die nur eine geringe Eintretenswahrscheinlichkeit besitzen. Solche Bedingungen werden mit großer Wahrscheinlichkeit nur durch eine sehr große Anzahl von Rechenläufen erfasst.

Die bekannteste Methode der stratifizierten Stichprobenauswahl ist das *Latin Hypercube* Verfahren, das in dieser Arbeit Anwendung findet.

Latin Hypercube sampling

Ein Beispiel hierfür ist in PECK et al., (1988) zitiert: p_1 und p_2 sollen voneinander unabhängige Parameter mit den Spannweiten $p_{1\min}$ bis $p_{1\max}$ und $p_{2\min}$ bis $p_{2\max}$ darstellen. Es sollen 4 Monte Carlo Läufe durchgeführt werden. Die Methode umfasst dann folgende Schritte:

- (1) Die Spannweiten von p_1 und p_2 werden in N Unterintervalle mit übereinstimmender Wahrscheinlichkeit³⁹ eingeteilt. Hat z.B. p_1 eine gleichförmige Verteilung, so ist die Länge jedes Unterintervalls gleich. Hat p_2 eine Normal-pdf, dann sind die Unterintervalle in Nähe des Mittelwertes kürzer als alle anderen (s. Abbildung D-6). Im Schritt SUFIX1B wird dieses Verfahren eingesetzt.

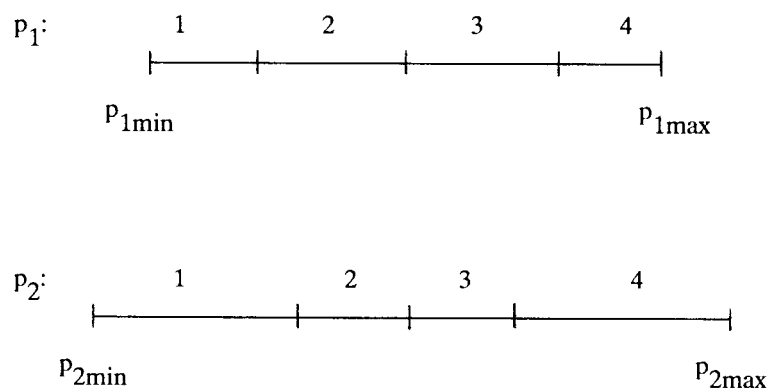


Abbildung D-6: Länge der Unterintervalle abhängig von der Wahrscheinlichkeitsverteilung, oben: gleichförmig, unten: Normalverteilung (aus Peck et al., 1988).

- (2) Jede Variable wird rein zufallsverteilt aus jeder Unterintervall gezogen. Man erhält schließlich N Werte jeden Parameters, je einen in jeder der N Klassen. Eine mögliche Verteilung ist in Abbildung D-7 gezeigt.
- (3) Für jeden Parameter p_i werden die N Werte basierend auf der ursprünglichen Reihenfolge $p_i^1 \dots p_i^N$ zufällig permutiert. Man erhält z. B. dann folgende Matrix:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_1^3, p_1^1, p_1^2, p_1^4 \\ p_2 &= p_2^4, p_2^1, p_2^3, p_2^2 \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

39. Das Integral der pdf über ein Unterintervall ist identisch für alle Unterintervalle

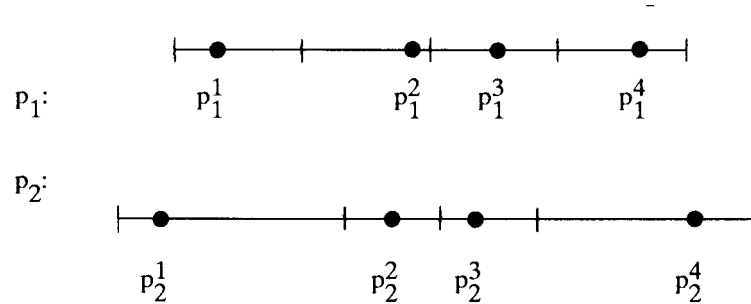


Abbildung D-7: Verteilung der gezogenen Werte in den Unterintervallen

- (4) Die den Spalten dieser Matrix zuzuordnenden Werte werden schlussendlich für die Monte Carlo Läufe sukzessive verwendet.

Das *Latin Hypercube* Verfahren ist exakt, was die Ermittlung des Mittelwertes der Modellergebnisse angeht. Für Momente höherer Ordnung oder für die Bestimmung der pdfs der Ergebnisse wird es dagegen als verzerrend angesehen. Nach PECK ET AL. (1988) erzielt man mit dem *Latin Hypercube*-Verfahren in jedem Falle jedoch bessere Ergebnisse bezüglich Mittelwert, Varianz, Kovarianz und pdf der Modellergebnisse als mit einer rein zufälligen Stichprobenauswahl.

D.5 Analytische Lösungsverfahren der stochastischen Strömungsgleichung

Zahlreiche Autoren haben versucht, die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $h(\mathbf{x})$ analytisch aus der Strömungsgleichung (Gleichung 2.7 auf Seite 41) abzuleiten. Gewöhnlich wird aber nicht die vollständige pdf von $h(\mathbf{x})$ abgeleitet, sondern nur die ersten zwei Momente: der Mittelwert und die Kovarianz-Funktion.

D.5.1 Die Spektral-Methode

Die Spektral-Methode wurde vor allem von Gelhar und seinen Mitarbeitern entwickelt und angewendet (z.B. GELHAR, 1976). In diesem Verfahren werden die Variablen und Parameter über einen Mittelwert plus einer Fluktuation um diesen Mittelwert definiert. Die Mittelwertberechnung erfolgt mittels einer gewöhnlichen deterministischen Partiellen Differentialgleichung. Die analytische Lösung gibt die funktionelle Abhängigkeit der Variable vom Mittelwert der Modellparameter an. Eine zweite Gleichung behandelt den Einfluss der Fluktuationen. Diese werden in den Spektralraum transformiert, was im Ergebnis das Spektrum der Variable als Funktion des Spektrum der Parameter liefert⁴⁰. Durch eine inverse Fouriertransfor-

40. Das Spektrum oder Spektraldichte ist die Fouriertransformierte der Kovarianzfunktion

mation ist es dann möglich, analytisch die Kovarianzfunktion der Variablen und somit auch die Varianz $\sigma^2 = C(0)$ zu berechnen. Durch die Beschränkung auf analytische Lösungen ist dieses Verfahren für Feldanwendungen mit komplexen Randbedingungen wenig geeignet. Nach DYKAAR & KITANIDIS (1992) bietet der analytische Lösungsansatz der Methode jedoch den Vorteil, dass für einen vorgegebenen Grad der Unsicherheit in den Modellergebnissen weniger Stichproben notwendig sind als z.B. mit einer Finiten-Differenzen Lösung. Anwendungen zusammen mit der Perturbations-Methode zeigen z.B. ÜNLÜ ET AL. (1990), der dort auch einen Vergleich mit der Monte Carlo-Methode vornahm. DENG & CUSHMAN (1992) führten ebenfalls einen derartigen Methodenvergleich durch.

D.5.2 Die Perturbation-Methode

Die Perturbation-Methode kann mit analytischen und numerischen Modellen und im Zusammenhang mit der Spektral-Methode verwendet werden. Die wesentliche Beschränkung dieser Methode liegt darin, dass die Parameterunsicherheit nur 'klein' sein darf. Dann können nämlich die Fluktuationen um den Mittelwert, unter Vernachlässigung der Terme 2. Ordnung in eine Taylor-Reihe entwickelt werden. Wie in der Spektral-Methode werden die Variable und die Parameter durch ihren jeweiligen Mittelwert und ihre Fluktuationen definiert. Hier werden die Fluktuationen jedoch mit einem 'kleinen' Faktor β multipliziert. Dies wird in die Partielle Differentialgleichung eingeführt, die dann in Ausdrücke von β von nullter und erster Ordnung entwickelt wird. Der Term nullter Ordnung stellt dann eine deterministische Gleichung für das Mittel dar. Aus dem Erwartungswert des Terms erster Ordnung kann man einen Ausdruck für die Kovarianz der Variable als eine Funktion der Kovarianz der Parameter erhalten. Anwendungen dieser Methode sind z.B. bei HASSAN ET AL. (1997) zu finden.

D.6 Unsicherheit - Chaos -Fehler

Die nachstehenden Definitionen orientieren sich an AN DER HEIDEN, (1996). Weil wir oft nicht imstande sind, alle Faktoren eines Ablaufs oder Vorgangs zu erfassen und zu berechnen, sprechen wir von zufälligen oder auch chaotischen Ereignissen. Hierzu gehören so einfache Dinge, wie die Vorhersage der Augenzahl beim Wurf eines Würfels, aber auch so komplexe Dinge wie die Prognose von zukünftigen Grundwasserständen. Diese Dinge sind anscheinend deshalb nur unzureichend vorherzusagen, weil wir normalerweise außerstande sind, alle Faktoren (wie etwa Bewegung der Hand, Luftwiderstand, Beschaffenheit der Tischoberfläche bzw. exakte Fließwege in den Poren des Untergrundes, exakter Aufbau des Untergrundes) zu bestimmen und in entsprechende mathematische Gesetze oder Modelle einfließen zu lassen. Diese Grundüberzeugung der Naturwissenschaften, dass alles was in der Natur geschieht, durch (Natur-)Gesetze bestimmt ist wird als Determinismus bezeichnet und herrschte mindestens bis zum Ende des 19. Jahrhunderts. Die Denkweise der Quantenphysik bildete hier Anfang des 20. Jahrhunderts einen wichtigen Gegenpol. Die 'deterministische' Weltanschauung ist am Beispiel des *Laplaceschen*

Dämons gut zu charakterisieren. Dieser ist in Kenntnis sämtlicher Naturgesetze in der Lage, wenn ihm einmal der Zustand der Welt zu einem einzigen Zeitpunkt vollständig bekannt ist, alle nachfolgenden und auch alle vorhergehenden Zustände der Welt aus den Naturgesetzen zu berechnen. Für diesen idealen Wissenschaftler gibt es also weder Unsicherheiten noch Chaos. Diese Erscheinungen beruhen nur auf Unkenntnis und mangelnder Vorhersage- und Berechnungskapazität und haben daher nur subjektiven und keinen objektiven Charakter (*subjektiver Zufall*). Der Grund, warum in gewissen Bereichen der Wissenschaften Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik verwendet werden, liegt also nicht darin, dass tatsächlich etwas zufällig geschieht, sondern weil die notwendigen Anfangs- und Randbedingungen nicht vollständig erfassbar bzw. nicht sicher vorhersagbar sind. Eng verknüpft mit dem Begriff der Unsicherheit bzw. genauer der Prognoseunsicherheit ist der Begriff des *deterministischen Chaos*. Der Begriff steht für die Vorstellung, dass ein auf strengen Gesetzen beruhendes Geschehen oder eine aufgrund von exakten Regeln entstandene Struktur durchaus den Charakter des Zufälligen und eine scheinbar völlig fehlende Ordnung zeigen kann. Als eigentliche Ursache der Datenunsicherheiten und der Prognoseunsicherheit von numerischen Modellen kann man nach dieser Definition das deterministische Chaos ansehen, das durch die scheinbar ungeordnete bzw. gering geordnete Struktur des Mediums hervorgerufen wird in dem sich Wasser und seine Inhaltsstoffe bewegen. Ein Charakteristikum des deterministischen Chaos ist das Phänomen der sogenannten *sensiblen Abhängigkeit von den Anfangszuständen*. Auch dieser Effekt ist leicht bei Stofftransportvorgängen im Untergrund nachzuweisen. Nach einer hinreichend großen Transportdistanz (anhängig von der Heterogenität des Untergrundes) können sich die Ausbreitungsfahnen zweier dicht zusammen liegender Infiltrationsstellen deutlich unterscheiden. Dieser Effekt tritt jedoch umso weniger in Erscheinung, je stärker die jeweils vorhandene Grundströmung das Geschehen prägt und diesen Effekt überlagert. Es ist eine allgemeine Konsequenz aus der 'sensiblen Abhängigkeit', dass mikroskopische Details nach einer gewissen Zeit zu makroskopischen Veränderungen führen. Die Ordnung im 'deterministischen Chaos' ist aus den Wahrscheinlichkeitsverteilungen, mit denen gewisse Ereignisse (bei oftmaliger Wiederholung) eintreten zu einem gewissen Teil ableitbar. Die Information, die man erhält, kann man dazu verwenden, Ereignisse zwar nicht mit Sicherheit aber mit einer *bestimmten* Wahrscheinlichkeit vorherzusagen.

D.7 Stoffeigenschaften

D.7.1 Transport in der wässrigen Phase als gelöster Stoff

Die Mechanismen für den Transport als im Wasser gelöster Inhaltsstoff differieren zwischen der gesättigten und der ungesättigten Bodenzone. Ein Transport über größere Entfernungen kann nur in der gesättigten Zone stattfinden, die Zeiten bewegen sich dabei grob zwischen einem und tausend Meter pro Jahr. Die Konzentration eines Stoffes im Grundwasser hängt vor allem von seiner Löslichkeit ab. Da die Löslichkeit üblicher organischer Schadstoffe stark variiert, und zudem beeinflusst wird

durch Hydrophobizität, Temperatur, Salzgehalt, gelöstem organischem Material oder durch die Anwesenheit von mehreren organischen Verbindungen in der Lösung, ist der Transport dieser Stoffe mathematisch schwierig zu erfassen.

Wenn ein Stoff einmal in Grundwasser gelöst ist, wird er in Richtung des Grundwassergefälles (des Potentialgradienten) transportiert. Dies bezeichnet man als advektiven (früher auch als konvektiver) Anteil des Transports. Wenn die Verbindung eine hohe Wasserlöslichkeit besitzt, kann sich die Dichte und Viskosität des Wassers ändern. Schon Dichteerhöhungen von 0.1% können zu einem langsamen Absinken in tiefere Untergrundbereiche einer Schadstofffahne entlang ihres Transportweges führen.

D.7.2 Transport in der Dampf-Phase

Die Tendenz eines Schadstoffes zur Verdampfung kann aus der Konstante im Henry-Gesetz bestimmt werden. Diese Konstante bezieht die Konzentrationen eines Stoffes in der gelösten Phase auf seinen partiellen Druck in der Gasphase. Schadstoffe mit hohen Werten der Henry-Konstante haben eine größere Verdampfungsneigung.

D.7.3 NAPL-Transport

Wie bei allen Fluiden gilt auch für die NAPL Migration, dass sie durch die folgenden Fluid-Eigenschaften geprägt wird: Dichte, Viskosität und Grenzflächen Spannung. Die Dichte bestimmt das Verhalten des Schadstoffes, wenn die gesättigte Bodenzone erreicht wird. Dabei tendieren LNAPLs dazu, sich mehr seitlich auf der Grundwasseroberfläche auszubreiten, während DNAPLs eher in der vertikalen Richtung weiter absinken. In Tabelle D-1 sind die Dichten einiger repräsentativer NAPLs mit aufgeführt. Die Viskosität beeinflusst die Migrationsrate von NAPLs. Fluide mit geringer Viskosität bewegen sich schneller wegen ihrem geringeren Fließwiderstand. Die gleiche Tabelle zeigt auch, dass viele NAPLs einschließlich einiger chlorierter und aromatischer Kohlenwasserstoffe Viskositäten besitzen, die kleiner sind, als die von Wasser (1.0 centipoise bei 20° C).

NAPLs tendieren dazu sich horizontal auszubreiten, wenn sie auf geringdurchlässige Schichten stoßen, wie dies in ähnlicher Weise beim Erreichen des Kapillarsaumes geschieht. Grenzflächenspannungen werden beeinflusst durch die Höhe des pH-Wertes und durch gelöste Bestandteile wie natürliche Humus-Substanzen, die sich wie oberflächenaktive Vermittler verhalten und die Kapillarkräfte verringern. Insgesamt ist die Ausbreitung von NAPLs als komplexer Vorgang zu beschreiben, der zu einer sehr ungleichförmigen Verteilung der Schadstoffe führt und die Aufgabe der Lokalisierung und Sanierung einer Kontamination zu einem höchst anspruchsvollen Unternehmen werden lässt.

Die konzeptionellen Vorstellungen über das typische Migrationsverhalten sind nachstehend kurz zusammengefasst.

DNAPLs⁴¹:

Beim Durchsickern der ungesättigten Zone kann der Schadstoff zum einen im Porenwasser gelöst werden, im Bereich des luftgefüllten Porenraumes verdampfen oder in den Porenzwickel festgehalten werden (Residualsättigung). Die Sickerbewegung des gelösten Stoffes und des Stoffes in Phase findet hier vorwiegend vertikal unter Schwerkrafteinfluss statt. Für den gelösten Stoff wird vorausgesetzt, dass die Matrixpotentialdifferenzen infolge unterschiedlicher Wassergehalte (was z.B. auch zu einem Aufsteigen des Bodenwassers führen kann) mit der Tiefe nicht zu sehr verschieden sind. Der Anteil des Schadstoffes der verdunstet kann sich jedoch frei bewegen, also auch lateral und wird damit den Kontaminationsbereich vergrößern. Wenn die DNAPLs den Grundwasserspiegel erreichen, wird sich bei genügend großer Stoffmenge die vertikale Ausbreitung nach gewisser Zeit verlangsamt fortsetzen und das Grundwasser verdrängen. In der gesättigten Bodenzone wird sich dann infolge von Lösungsvorgängen der DNAPLs im Grundwasser einer Schadstofffahne ausbilden. Der Rest der DNAPLs wird sich, wegen der höheren Wichte gegenüber Wasser weiter nach unten bewegen. In den Zwickeln der Poren bleibt dabei ein Residualgehalt des Schadstoffes zurück, der nicht mehr an der Ausbreitung infolge der konvektiven Grundwasserbewegung teilnimmt. Erst bei Erreichen einer relativ undurchlässigen Tonschicht werden die sich in der ungelösten Phase befindenden Stoffe auch seitwärts ausbreiten und hier u.U. ansammeln. Insgesamt betrachtet werden sich DNAPLs aber infolge der hohen Wichte bevorzugt vertikal bewegen.

LNAPLs:⁴²

Das Ausbreitungsverhalten in der ungesättigten Zone wird sich von dem eines DNAPL nicht wesentlich unterscheiden. Wenn jedoch die gesättigte Zone erreicht wird, wird sich eine *Linse* auf der Grundwasseroberfläche bilden. Die *Linse* wird sich bevorzugt in Richtung des Grundwassergefälles bewegen und infolge der Dispersion auch weiter ausbreiten. Verändert sich die Lage der Grundwasseroberfläche z.B. infolge jahreszeitlicher Änderungen der Neubildungsraten oder durch Pumpen, so wird sich auch ein LNAPL vertikal im Untergrund verteilen können und den Kontaminationsbereich damit vergrößern.

Die hierbei auftretenden Mechanismen der Retention haben zwei Auswirkungen: Sie retardieren die Ausbreitung der Schadstoffe und sie erzeugen Langzeitquellen für die Elution der Schadstoffe. Der Grad der Retardierung eines Stoffes hängt von vielen Faktoren ab. Hierzu gehören

- die Art des Transports: im Wasser gelöst, gasförmig oder in Phase (als NAPL),
- sein chemisches Verhalten und die
- chemischen und physikalischen Eigenschaften des porösen Mediums.

41. Dense NonAqueous Phase Liquid, mit einer Dichte > 1 .

42. Light Non Aqueous Phase Liquid

Zwei primäre Arten der Retention sind die Sorption und das Zurückhalten des Stoffes in Phase (NAPL *entrapment*).

Das NAPL *entrapment* entsteht dadurch, dass durch die Stärke der Kapillarkräfte die 'gefangenen' NAPL nicht durch die Grundwasserströmung bei üblichen Bedingungen hydraulischer Sanierungssysteme mobilisiert werden können. Da NAPLs nur eine geringe Wasserlöslichkeit besitzen ist die Entfernung von *entrapped* NAPLs ein sehr langsamer Prozess.

Tabelle D-1: Eigenschaften von repräsentativen organischen Schadstoffen im Grundwasser (aus AFGWC, 1994)

Schadstoff	Dichte [kg/cm ³]	Wasserlöslichkeit [mg/l]	Viskosität [cP]
Trichlorethen (Tri)	1,5	1100	
Tetrachlorethen (Tetra, Per)	1,6	160	
1,1,1-Trichlorethan	1,31	1300	
Benzen	0,873	1500	0,603
Tuluol	0,862	535	0,552
Pyren	1,27	0,13	- (Schmelzpunkt 150 °C)

E Glossar

Anisotropie: Wenn die räumliche Korrelation einer hydraulischen Eigenschaft richtungsabhängig ist, zeigt das Modell der räumlichen Abhängigkeiten eine statistische Anisotropie. In Grundwasserströmungsanwendungen bedeutet Anisotropie, dass eine bevorzugte physikalische Richtungsbindung gibt. Ein Medium kann lokal isotrop sein, selbst wenn es sich statistisch anisotrop darstellt.

Bevorzugte Fließwege: Hierunter werden verbundene Einheiten mit großer hydraulischer Durchlässigkeit verstanden, die röhrenähnliche Strukturen annehmen können. Das Gegenteil hierzu wird als Strömungsbarriere bezeichnet.

Boden: In dieser Arbeit synonym mit Untergrund verwendet. Umfasst damit sowohl die ungesättigte als auch die gesättigte Bodenzone. In der Bodenkunde wird dagegen folgende Definition verwendet: "Boden ist das mit Wasser, Luft und Lebewesen durchsetzte, unter dem Einfluss der Umweltfaktoren an der Erdoberfläche entstandene, und im Ablauf der Zeit sich weiterentwickelnde Umwandlungsprodukt mineralischer und organischer Substanzen, das in der Lage ist, höheren Pflanzen als Standort zu dienen".

Channeling : Bezieht sich auf fluviale Ablagerungen in ehemaligen Flussrinnen (Paläorinnen). Auch in Verbindung mit dem Transport von Wasserinhaltsstoffen entlang → bevorzugten Fließwegen.

Fazies: Zusammenfassung von ähnlichen Charakteristiken, die üblicherweise die Entstehung einer Gesteinseinheit widerspiegeln. Die Fazies dient zur Unterscheidung der Einheit gegenüber Nachbareinheiten.

Fehler : Vermeidbare Abweichungen von einer bekannten Parameterverteilung

Grundwassermodell: Wird hier als Sammelbegriff für mathematisch-numerische Strömungs- und Transportmodelle verwendet.

Heterogenität: s. Räumliche Variabilität einer Bodeneigenschaft bzw. eines Modellparameters.

Konditionierung: Methode zur Generierung von Parameterverteilungen, bei der bekannte Messwerte an ihrem räumlichen Bezugspunkt exakt nach-

gebildet werden. Einige Methoden erreichen dies während des Generierungsprozesses, während bei anderen dies in einem nachgeschalteten Prozessschritt geschieht.

Kalibrierung: Prozess bei dem die Parameterwerte eines mathematischen Modells so angepasst werden, dass eine größtmögliche Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten Werten entsteht.

Korrelation: Im geologischen Sinne bedeutet Korrelation die Ableitung (Folgerung) der Geologie zwischen den vorhandenen Bohrdaten. Dies kann basieren auf

- (1) der Lithologie (lithologische Korrelation)
- (2) der Biologie (biostratigrafische Korrelation)
- (3) dem Alter (chronostratigrafische Korrelation)
- (4) charakteristischen Signaturen aus geophysikalischen Logs (petrophysikalische Korrelation)
- (5) wird in der Geostatistik aus einem experimentellen Variogramm ermittelt. Wenn die räumliche Korrelation zwischen zwei Variablen verschwindet oder als vernachlässigbar jenseits eines bestimmten Abstandes angesehen werden kann, wird dieser Abstand als Reichweite (*range*) bezeichnet.

Modell: Ein Modell ist eine vereinfachte Wiedergabe der Realität. Es enthält einen Satz von vereinfachenden Annahmen. Hier ist die interessierende Realität die Verteilung der hydraulischen Eigenschaften in sedimentären Ablagerungen.

Numerisches Modell: Die Übersetzung eines mathematischen Modells in eine Form, die für die Lösung mittels eines Computers geeignet ist.

Mathematisches Modell: Ist ein Satz von maßgebenden Gleichungen, deren Lösung beschränkt wird durch sachgemäße Anfangs- und Randbedingungen.

Konzeptionelles Modell: Auch Modellkonzeption oder (Konzeptionelles) hydrogeologisches Modell. Es beschreibt qualitativ, wie ein Grundwasserströmungssystem funktioniert. Voraussetzung für den Einsatz eines mathematischen Modells.

Räumliche Variabilität: wird gleichwertig mit Heterogenität gebraucht. Bedeutet, dass Werte der hydraulischen Eigenschaften sich mit ihrer räumlichen Lage ändern können. Wenn ein Zufallsfunktionsmodell zur Darstellung der hydraulischen Eigenschaften verwendet wird, wird oft die Annahme von statistischer Homogenität ('Stationarität zweiter Ordnung') gemacht. Dann sind das Mittel und die Varianz einer hydraulischen Eigenschaft räumlich invariant und die Kovarianz hängt

nur von dem Abstand der Punkte ab.

Simulation: Wird in wechselnden Zusammenhängen gebraucht. Allgemein wird hier der Lösungsprozess eines mathematischen Modells der Grundwasserströmung und des -transports mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen verstanden.

Stochastische Simulation: Auch "'stochastic imaging'". Generierung von gleichwahrscheinlichen räumlichen Verteilungen (Karten, Realisationen) eines Modellparameters mittels räumlicher statistischer Methoden der Geostatistik.

Numerische Simulation: Auch Modellsimulation. Wird hier gleichbedeutend mit Simulation (ohne Zusatzbezeichnung) gebraucht.

Skala: Mit Skala wird die Ausdehnung des Gebietes bezeichnet, in dem Messwerte gewonnen, interpoliert, simuliert oder einfach nur betrachtet werden.

Strukturen: kann in mindestens vier differierenden Zusammenhängen benutzt werden:

Primäre sedimentäre Strukturen: sind Eigenschaften, die sich während der Deposition ausprägen (wie *ripples* und *cross bedding*)

Deformationsstrukturen: sind die Folge von Spannungen, die nach der Deposition auftreten

Räumliche Struktur: einer hydraulischen Eigenschaft des Aquifers und das Synonym (Aquifer-Architektur) beziehen sich auf die Geometrie und die Anordnung der Eigenschaftsfelder

Statistische Struktur: bezieht sich auf die Funktionen, die zur Wiedergabe der räumlichen Korrelation verwendet werden.

'upscaling': Aus Werten, die mit Bezug auf ein kleines Messvolumen ermittelt wurden, können mit einer 'upscaling'-Prozedur effektive Werte ermittelt werden, die für ein größeres Messvolumen maßgebend sind. Dieser Vorgang wird auch 'Homogenisierung' genannt.

Unsicherheit: Nicht vermeidbarer Fehler in den Eingangsdaten einer Grundwassermodellierung, bedingt durch die immer unzureichende Kenntnis der räumlichen Verteilung von Modellparametern

Ungenauigkeit: Ergibt sich z.B. durch Rundungsfehler.

F Symbole und Abkürzungen

Symbol/ Formelzeichen/ Abkürzung	Einheit ^a	Bedeutung/Bezeichnung
c	M/L ³	Berechnete oder gemessene Konzentrationen eines gelösten Wasserinhaltsstoffes
C		Kovarianzfunktion eines Zufallsfeldes
D	L ² /T	Dispersionstensor
d ₁₀ , d ₆₀	L	Maschenweite bei der ein Siebdurchgang von 10% bzw. 60% erreicht wird
div		Divergenz eines Vektorfeldes
grad		Gradient eines Skalarfeldes
h	L	Abstand zweier Messpunkte im experimentellen Variogramm
h	L	Berechnetes oder gemessenes Grundwasserpotential
k _f , k	L/T	Hydraulische Durchlässigkeit (Leitfähigkeit) des Bodens
ln	-	natürlicher Logarithmus
n	-	(effektive) Porosität
P[A]		Wahrscheinlichkeit des Eintretens von Ereignis A
P[A B]		Bedingte Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von Ereignis A, unter der Bedingung der Ergebnisse von Ereignis B
pdf	-	Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Wahrscheinlichkeitsfunktion(von: probability density function)
S ₀	-	Speicherkoeffizient
v	L/T	Abstandsgeschwindigkeit
Y	-	ln transformierte hydraulische Durchlässigkeiten
Z		räumliches Zufallsfeld
x,y,z	L	Ortskoordinaten
x	L	Ortsvektor
x _m	versch.	Messwert
x _s	versch.	Modellwert (simuliert)

Symbol/ Formelzeichen/ Abkürzung	Einheit ^a	Bedeutung/Bezeichnung
γ	-	Variogrammwert
λ	-	Gewicht einer Messung bei der Kriging Interpolation
μ		Mittelwert (allgemein) einer statistischen Verteilung
ρ	M/L ³	Dichte
σ		Standardabweichung
ξ		mögliche Ergebnisse der Funktion Z

a. SI-Einheiten: L: Länge (m), M: Masse (kg), T: Zeit (s).

Erklärung der Bedeutung typischer Zielfunktionstypen:

	ZF-Typ	IDI	ID-	-DI	-D-	III	-II
Zeit	stationäre Rechnung			X	X		X
	instationär (über alle Zeitschritte integriert)	X	X			X	
	instationär (Differenzierte Auswertung nach Zeitschritten)						
Ort	räumliche Integration über alle Messstellen					X	X
	räumliche Differenzierung nach Messstellen	X	X	X	X		
Simulation	deterministische Rechnung (nur 1 Simulation)		X		X		
	Integration über alle Simulationen	X		X		X	X
	differenzierte Auswertung nach Simulationen						

Weitere bzw. abweichende Symbole sind im Text erläutert.

Literaturverzeichnis

- [1] Abbaspour, K. C.; Van Genuchten, M. T.; Schulin, R.; Schläppi, E. (1997): A sequential uncertainty domain inverse procedure for estimating subsurface flow and transport parameters. *Water Resour. Res.*, **33** (8), 1879-1892.
- [2] Abbaspour, K. C.; Schulin, R.; Van Genuchten, M. T.; Schläppi E. (1998): Procedures for Uncertainty analyses applied to a landfill leachate plume. *Ground Water*, **36** (6), 874-883.
- [3] Abbaspour, K. C.; Sonnleitner, M. A.; Schulin R. (1999): Uncertainty in Estimation of soil hydraulic parameters by inverse modeling: Example Lysimeter experiments. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **63** (3), 501-509.
- [4] Abbaspour, K. C.; Matta, V.; Huggenberger, P.; Johnson, C. A. (2000): A contaminated site investigation: comparison of information gained from geophysical measurements and hydrogeological modeling. *J. Contamin. Hydrol.*, **40**, 365-380.
- [5] Allen-King, R. M.; Halket, R. M.; Gaylord, D. R.; Robin, M. J. L. (1998): Characterizing the heterogeneity and correlation of perchloroethene sorption and hydraulic conductivity using a facies-based approach. *Water Resour. Res.*, **34**, (3), 385-396.
- [6] An der Heiden, U. (1996): Chaos und Ordnung, Zufall und Notwendigkeit. In: *Chaos und Ordnung - Formen der Selbstorganisation in Natur und Gesellschaft*. Reclam Universal Bibliothek Nr. 9434, Stuttgart.
- [7] Anderson, M. P. (1989): Hydrogeologic facies models to delineate large-scale spatial trends in glacial and glaciofluvial sediments. *Geological Society of America Bulletin*, **101**, 501-511.
- [8] Anderson, M. P. (1997): Characterization of geological heterogeneity, in: *Subsurface Flow and Transport - A Stochastic Approach*. Cambridge University Press, 23-43.
- [9] Andersson, Ch.; Destouni, G. (2001): Risk-Cost Analysis in Ground Water Contaminant Transport: The Role of Random Spatial Variability and Sorption Kinetics. *Ground Water* **39**, 35-48.
- [10] Ang, A. H. S.; Tang, W. H. (1984): Probability concepts in engineering planning and design, Vol. II, Decision, Risk and Reliability. J. Wiley & Sons, New York.

- [11] Bardossy, A. (1997): TRUNGA 3-D, Truncated Gaussian Simulation Programm, Version 1.0 - Kurzbeschreibung (unveröffentlicht). Universität Stuttgart.
- [12] Battermann, G.; Zipfel, K., (1989): Transport under instationary groundwater flow conditions - Verification of numerical modeling, investigations and remedial actions, in: Proceedings of the International Symposium on Contaminant Transport in Groundwater. Stuttgart, 463-464
- [13] Bear, J.; Sun, Y. (1998): Optimization of pump-treat-inject (PTI) design for the remediation of a contaminated aquifer: multi-stage design with chance constraints. *J. Contam. Hydrol.* **29**, 225-244.
- [14] Berglund, S. (1997): Aquifer remediation by pumping: A model for stochastic-advective transport with nonaqueous phase liquid dissolution. *Water Resour. Res.* **33** (4), 649-661.
- [15] Berkowitz, B. (1993): Groundwater Modelling, World Meteorological Organization, Geneva.
- [16] Beven K.; Binley A. (1992): The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction. *Hydrol. Processes* **6**, 279-298.
- [17] Beyer, W. (1964): Zur Bestimmung der Wasserdurchlässigkeit von Kiesen und Sanden aus der Kornverteilungskurve. *WWT* **14** (6), 165-168.
- [18] Bhatt, K. (1993): Uncertainty in wellhead protection area delineation due to uncertainty in aquifer parameter values. *J. Hydrol.*, **149**, 1-8.
- [19] Bierkens, M. F. P. (1994): Complex confining layers - a stochastic analysis of hydraulic properties at various scales. *Nederl. Geograf. Studies* 184, Utrecht.
- [20] Bras, R.F.; Rodriguez-Iturbe, I. (1985): Random functions and Hydrology. Addison Wesley, Reading M.A. .
- [21] BfG (1994): Einfluß der Bodenvariabilität auf den Transport von radioaktiven Stoffen in der ungesättigten und gesättigten Zone - 1. Bericht - Grundlagen und Verfahren (Literaturauswertung). - Bundesanstalt für Gewässerkunde BfG-Nr. 0873; Koblenz (unveröffentlicht).
- [22] BfG (1995): Einfluß der Bodenvariabilität auf den Transport von radioaktiven Stoffen in der ungesättigten und gesättigten Zone - 2. Bericht - Geostatistische Charakterisierung der Hydrofaziesverteilung im Neuwieder Becken und deren stochastische Simulation als Vorarbeiten für Modelluntersuchungen. - Bundesanstalt für Gewässerkunde BfG-Nr. 0964; Koblenz (unveröffentlicht).
- [23] BfG (1995b): Einfluß der Bodenvariabilität auf den Transport von radioaktiven Stoffen in der ungesättigten und gesättigten Zone - 3. Bericht - Charakterisierung der Unsicherheiten bei numerischen Ausbreitungsberechnungen mit Hilfe des Monte-Carlo-Verfahrens - Bundesanstalt für Gewässerkunde BfG-Nr. 1031; Koblenz (unveröffentlicht).

- [24] Busch, K.-F.; Luckner, L.; Tiemer, K. (1993): Geohydraulik, Lehrbuch der Hydrogeologie Band 3, 3. Aufl.. Gebr. Borntraeger, Berlin, Stuttgart.
- [25] Capilla, J. E.; Gómez-Hernández, J. J.; Sahuquillo, A. (1997): Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - 2. Demonstration on a synthetic aquifer. *J. Hydrol.*, **203**, 175-188.
- [26] Carrera, J. (1993): An overview of uncertainties in modelling groundwater solute transport. *J. Contam. Hydrol.*, **13**, 23-48 .
- [27] Chrysikopoulos, C. V. (1995): Effective parameters for flow in saturated heterogeneous porous media. *J. Hydrol.* **170**, 255-275.
- [28] Cirpka, O. (1997): Numerische Methoden zur Simulation des reaktiven Mehrkomponententransports im Grundwasser. Inst. für Wasserbau der Univ. Stuttgart, Heft 95.
- [29] Clement, T.P. (1997): RT3D - A Modular Computer Code for Simulating Reactive Multi-Species Transport in 3-Dimensional Groundwater Aquifers. Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington. PNNL-11720.
- [30] Cooley, R. L. (2000): An analysis of the pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields. *Water Resour. Res.* **36** (4), 1159-1163.
- [31] Coptý, N. K.; Findikakis, A. N. (2000): Quantitative estimates of the uncertainty in the evaluation of ground water remediation schemes. *Ground Water*, **38** (1), 29-37.
- [32] Computational Science (1995): Education project, Introduction to Monte Carlo Methods. URL: <http://csep1.phy.ornl.gov/mc/mc.html>
- [33] Criminisi, A.; Tucciarelli, T.; Karatzas, G. P. (1997): A methodology to determine optimal transmissivity measurement locations in groundwater quality management models with scarce field information. *Water Resour. Res.* **33** (6), 1265-1274.
- [34] Dagan, G. (1988): Time-Dependent Macrodispersion for Solute Transport in Anisotropic Heterogeneous Aquifers. *Water Resour. Res.* **24** (9), 1491 - 1500.
- [35] Dagan, G. (1997): Stochastic modeling of flow and transport - the broad perspective, in: *Subsurface Flow and Transport - A Stochastic Approach*. Cambridge University Press, 3-20.
- [36] Daly, C.; Verly, G. W. (1994): Geostatistics and Data Integration, in: *Geostatistics for the next century*, 94-107.

- [37] Damrath, Kobus, Schöttler, Zipfel, (1979): Wasserinhaltsstoffe im Grundwasser - Reaktionen, Transportvorgänge und deren Simulation, Berichte 4/79, Umweltbundesamt, E. Schmidt Verlag, Berlin.
- [38] Davis, J. M.; Lohmann, R. C.; Phillips, F. M.; Wilson, J. L.; Love, D. W. (1993): Architecture of the Sierra Ladrones Formation, Central New Mexico: Depositional controls on the permeability correlation structure. Geological Society of America Bulletin, **105**, 998-1007.
- [39] De Fouquet, C. (1994): Reminders on the conditioning Kriging, in: Geostatistical Simulations. Hrsg.: M. Armstrong & P.A. Dowd.
- [40] Delhomme, J. P. (1979): Spatial Variability and Uncertainty in Groundwater Flow Parameters: A Geostatistical Approach. Water Resour. Res. **15** (2), 269-280.
- [41] De Marsily, G. (1986): Quantitative hydrogeology, Groundwater hydrology for engineers. Academic Press, Orlando.
- [42] De Marsily, G.; Lavedan, G.; Boucher, M.; Fasanino, G. (1984): Interpretation of inference tests in a well field using geostatistical techniques to fit the permeability distribution in a reservoir model. In: Geostatistics for Natural Resources Characterization, eds. G. Verly et al., Part 2, D. Reidel Publ. Comp., p 831-849
- [43] Deng, F.-W.; Cushman, J. H. (1992): On spectral measure and Monte Carlo approaches to flow in heterogeneous media. Water Resour. Res., **28** (5), 1447-1450.
- [44] Deutsch, C. V.; Cockerham P. W. (1994): Practical considerations in the application of simulated annealing to stochastic simulation. Mathematical Geology **26** (1), 67-82.
- [45] Deutsch, C.; Journel, A. (1998): GSLIB, Geostatistical Software Library and User's Guide - 2nd Edition. Oxford University Press, New York.
- [46] Dietrich, P.; Fechner T., (1995): Einsatz tomographischer Verfahren zur Erkundung von Aquiferparametern. Z. dt. geol. Ges. **146**, 161-166.
- [47] Durner, W. (1991): Vorhersage der hydraulischen Leitfähigkeit strukturierter Böden. Dissertation Universität Bayreuth.
- [48] DVWK (1991): Sanierungsverfahren für Grundwasserschadensfälle und Altlasten - Anwendbarkeit und Beurteilung. DVWK Schriften Nr. 98.
- [49] Dykaar, B. B.; Kitanidis, P. K. (1992): Determination of the effective hydraulic conductivity for heterogeneous porous media using a numerical spectral approach: 1. Method. Water Resour. Res. **28** (4), 1155-1166.

- [50] Dykaar, B. B.; Kitanidis, P. K. (1992b): Determination of the effective hydraulic conductivity for heterogeneous porous media using a numerical spectral approach: 2. Results. *Water Resour. Res.* **28** (4), 1167-1178.
- [51] Ehlschlaeger, Ch. R. (1998): The Stochastic Simulation Approach: Tools for Representing Spatial Application Uncertainty. <http://everest.hunter.cuny.edu/~chuk/dissertation/fullDissertation.html>
- [52] Essaid, H. I.; Hess, K. M. (1993): Monte Carlo Simulations of Multiphase Flow Incorporating Spatial Variability of Hydraulic Properties. *Ground Water*, **31** (1), 123-134.
- [53] Fachsektion Hydrogeologie (1999) in der Deutschen Geologischen Gesellschaft: Hydrogeologische Modelle, Schriftenreihe der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Heft 10.
- [54] Fahrmeier, L.; Kaufmann, H.; Ost, F. (1981): Stochastische Prozesse, Eine Einführung in Theorie und Anwendungen. Hanser Verl., München.
- [55] Feyen, L.; Beven K. J.; De Smedt, F.; Freer, J. (2001): Stochastic capture zone delineation within the generalized likelihood uncertainty estimation methodology: Conditioning on head observations. *Water Resour. Res.* **37** (3), 625-638.
- [56] Fogg, G.E. (1986): Groundwater flow and sand body interconnectedness in a thick multiple-aquifer system. *Water Resour. Res.* **22** (5), 679-694.
- [57] Fogg, G.E. (1990): Architecture of low-permeability geologic media and its influence on pathways for fluid flow. In: *Hydrogeology of Low Permeability Environments*. Verlag H. Heise, 19-40.
- [58] Freer, J.; Beven, K. J.; Ambrose, B. (1996): Bayesian estimation of uncertainty in runoff prediction and the value of data: an application of the GLUE approach. *Water Resour. Res.* **32** (7), 2161 - 2173.
- [59] Freeze, R.A. (1975): A stochastic-conceptual analysis of one dimensional groundwater flow in a nonuniform homogeneous media. *Water Resour. Res.* **11** (5), 725-741.
- [60] Freeze, R.A.; Cherry, J.A. (1979): *Groundwater*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J..
- [61] Freeze, A. R.; Massmann J. (1990): Hydrogeological Decision Analysis: 1. A Framework. *Ground Water* **28** (5), 738-766.
- [62] Gelhar, L. W. (1976): Effects of hydraulic conductivity variations on groundwater flows. *Proc. Second International IAHR Symposium on Stochastic Hydraulics*, IAHR, Lund, Sweden.
- [63] Gelhar, L. W.; Axness, C. L. (1983): Three dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resour. Res.* **19** (1), 161-180.

- [64] Gelhar, L. W. (1993): Stochastic of Subsurface Hydrology. Englewood Cliffs, N.J.; Prentice Hall.
- [65] Giebel, H.; E. Götz; H.J. Theis; K. Ubell; (1990): Hydrogeologie und Grundwasserhaushalt im Neuwieder Becken. - Besondere Mitteilungen zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch. Bundesanstalt f. Gewässerkunde.
- [66] GMS (2004): Groundwater Modeling System (GMS) Online Help. URL: http://www.bossintl.com/online_help/gms/source/model_calibration/parameter_estimation/pilot_points.htm
- [67] Gómez-Hernández, J. J.; Gorelick, S. M. (1989): Effective Groundwater Model Parameter Values: Influence of Spatial Variability of Hydraulic Conductivity, Leakage, and Recharge. *Water Resour. Res.* **25** (3), 405 - 419.
- [68] Gómez-Hernández, J.J.; Journel, A.G. (1992): Joint sequential simulation of multi-Gaussian fields. In: Proc. of the 4th Int. Geostat. Congress, Troia, v.92, 85-94.
- [69] Gómez-Hernández, J. J.; Wen, X.-H. (1994): Probabilistic Assessment of Travel Times in Groundwater Modeling, *Stochastic Hydrology and Hydraulics*. **8** (1), 19-56.
- [70] Gómez-Hernández, J. J.; Sahuquillo, A.; Capilla, J. E. (1997): Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - I. Theory. *J. Hydrol.* **203**, 162-174
- [71] Graham, W.D.; McLaughlin, D. (1990): Stochastic modelling of solute transport in groundwater - application to a field tracer test. In: Calibration and reliability in groundwater modelling, IAHS Publication No. 195.
- [72] Hassan, A. E.; Cushman, J. H.; Delleur, J. W. (1997): Monte Carlo studies of flow and transport in fractal conductivity fields: Comparison with stochastic perturbation theory. *Water Resour. Res.* **33** (11), 2519-2534.
- [73] Hassan, A. E.; Cushman J. H. (1998): Significance of porosity variability to transport in heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.* **34** (9), 2249-2259.
- [74] Hazen, A. (1892): Some physical properties of sands and gravels with special reference to their use in filtration. Twenty-fourth annual report state board of health Mass. Boston Mass, 541-556.
- [75] Hess, K. M.; Wolf, S. H.; Celia, M. A. (1992): Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts: 3. Hydraulic Conductivity Variability and Calculated Macrodispersivities. *Water Resour. Res.* **28** (8), 2011-2027
- [76] Hewett, T. A. (1992): Modelling reservoir heterogeneity with fractals. In: Geostatistics Troia '92, **1**, 455-467

- [77] James, B. R.; Gorelick, S. M. (1994): When enough is enough: The worth of monitoring data in aquifer remediation design. *Water Resour. Res.*, **30** (12), 3499-3513.
- [78] James, A. L.; Oldenburg C. M. (1997): Linear and Monte Carlo uncertainty analysis for subsurface contaminant transport simulation. *Water Resour. Res.* **33** (11), 2495-2508.
- [79] Jensen, J. B.; Scaarup-Jensen, K. (2002): Delineation of capture zones by an integrated surface/subsurface model using the GLUE methodology. In: *Calibration and Reliability in Groundwater Modelling - A few steps closer to reality*, IAHS Publ. No. 277. 478-488.
- [80] Johnson, N. M.; Dreiss, S. J. (1989): Hydrostratigraphic Interpretation Using Indicator Geostatistics. *Water Resour. Res.* **25** (12), 2501-2510.
- [81] Johnson, N. M. (1995): Characterization of alluvial hydrostratigraphy with indicator semivariograms. *Water Resour. Res.* **31** (12), 3217-3227.
- [82] Journel, A.G. (1983): Nonparametric estimation of spatial distributions. *Mathematical Geology*, **15** (3), 445-468.
- [83] Journel, A. G.; Huijbregts, C. J. (1978): *Mining geostatistics*. Academic Press, London.
- [84] Keidser, A.; Rosbjerg, D. (1991): A comparison of four inverse approaches to groundwater flow and transport parameter identification. *Water Resour. Res.* **27** (9), 2219-2232.
- [85] Kiefer, E.-M. (1992): Hydrodynamisch-numerische Simulation der Wasserbewegung im ungesättigten und gesättigten Boden unter besonderer Berücksichtigung seiner natürlichen Variabilität. *Wasserbau und Wasserwirtschaft*, Heft 71, Technische Universität München.
- [86] Kinzelbach, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. *Schriftenr. gwf-Wasser/Abwasser*, Band 21, Oldenbourg Verlag, München.
- [87] Köhne, M.; Piotrowski, J. A. (1995): Geostatistische Regionalisierung von Durchlässigkeitsbeiwerten (kf) im Testfeld Belau, Schleswig-Holstein: 2D-, 3D- und Indikator-Kriging. *Z. dt. geol. Ges.*, **146**, 399-414
- [88] Koltermann, C. E.; Gorelick, S. M. (1996): Heterogeneity in sedimentary deposits: A review of structure-imitating, process-imitating, and descriptive approaches. *Water Resour. Res.* **32** (9), 2617-2658.
- [89] Kupfersberger, H.; Deutsch, C. V. (1999): Ranking stochastic realizations for improved aquifer response uncertainty assessment. *J. Hydrol.* **223**, 54-65.
- [90] Kussmaul, H.; Simon, H.; Moser, H.; Stichler, W.; Zenz, H.; Zipfel, K. (1986): Protection of a Drinking Water Facility downstream of an Industrial

- Area, in Proceedings of 5th International Symposium on Underground Water Tracing. Athens, 301-309.
- [91] Kussmaul, H.; Simon, H.; Moser, H.; Stichler, W.; Zenz, H.; Zipfel, K.; Battermann, G. (1988): Trinkwassergefährdung durch eine Grundwasserkontamination mit leichtflüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen - Erkennung und Sanierung. *Vom Wasser*, Bd. 70, 141-162.
 - [92] Langguth, H. R.; Voigt, R. (1980): *Hydrogeologische Methoden*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York.
 - [93] Lavenue, A. M.; RamaRao, B. S.; de Marsily, G.; Marietta, M.G. (1995): Pilot-point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 2. Application. *Water Resour. Res.* **31** (3), 495-516.
 - [94] Lensing, H. J. (1995): Numerische Modellierung mikrobieller Abbauprozesse im Grundwasser. *Inst. für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe*, Heft 51.
 - [95] Liu, H. H.; Molz, F. J. (1997): Multifractal analyses of hydraulic conductivity distributions. *Water Resour. Res.* **33** (11), 2483-2488.
 - [96] Mahar, P. S.; Datta, B. (1997): Optimal monitoring network and groundwater-pollution source identification. *J. Water Resour. Planning and Management*, **123**, (4), 199-207.
 - [97] Mantoglou, A.; Wilson, J. L. (1982): The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method. *Water Resour. Res.* **18**, 1379-1384.
 - [98] Matheron, G. (1965): *Les variables regionalisées et leur estimation*, Mason et Cie., Paris.
 - [99] Matheron, G. (1973): The intrinsic random functions and their applications. *Adv. Appl. Probab.* **5**, 439-468.
 - [100] McCloskey, T. F.; Finnemore, E. J. (1996). Estimating hydraulic conductivities in an alluvial basin from sediment facies models. *Ground Water* **34** (6), 1024-1032.
 - [101] McDonald, M. G.; Harbaugh, A. W. (1988): A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. - Book 6 of *Techniques of water-resources investigations of the United States Geological Survey*.
 - [102] McLaughlin, D.; Townley, L. R. (1996): A reassessment of the groundwater inverse problem, *Water Resour. Res.* **32** (5), 1131-1161.
 - [103] Meier-Löhr, M. (1998): Bilanzierung und Modellierung von biologischen und chemisch-physikalischen Prozessen bei der in-Situ Sanierung von kohlenwasserstoffverunreinigten Grundwassersystemen. *Dissertation, TU Dresden*.

- [104] National Research Council (1994): Alternatives for Ground Water Cleanup. U.S. Department of Commerce, National Technical Information Service.
- [105] Neuman, S. P. (1982): Statistical characterization of aquifer heterogeneities - an overview. Geological Society of America, Special Paper 189, 81-102.
- [106] Pannatier, Y. (1996): VARIOWIN. Software for spatial data analysis in 2D, Springer, New York.
- [107] Peck, A.; Gorelick, S.; de Marsily, G.; Kovalevsky, V. (1988): Consequences of spatial variability in aquifer properties and data limitations for groundwater modelling practice. IAHS Publication No. 175.
- [108] Poeter, E.; Gaylord, D. R. (1990): Influence of Aquifer Heterogeneity on Contaminant Transport at the Hanford Site. *Ground Water* **28**, (6) 900-909.
- [109] Rabideau, A. J.; Miller, C. T. (1994): Two-dimensional modeling of aquifer remediation influenced by sorption nonequilibrium and hydraulic conductivity heterogeneity. *Water Resour. Res.* **30** (5), 1457-1470.
- [110] RamaRao, B. S.; Lavenue, A. M.; de Marsily, G.; Marietta, M. G. (1995): Pilot-point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields 1. Theory and computational experiments. *Water Resour. Res.* **31** (3), 475-493.
- [111] Rauber, M.; Stauffer, F.; Huggenberger, P.; Dracos, T. (1998): A numerical three-dimensional conditioned/unconditioned stochastic facies type model applied to a remediation well system. *Water Resour. Res.* **34** (9), 2225-2233.
- [112] Rinne, H. (1995): Taschenbuch der Statistik. Verl. Harri Deutsch, Thun u. Frankfurt a. Main.
- [113] Rovey II, C. W.; Cherkauer, D. S. (1995): Scale dependency of hydraulic conductivity measurements. *Ground Water* **33** (5), 769-780
- [114] Ruan, F.; McLaughlin, D.; Shuguang, L. (1999): A general technique for assessing the numerical accuracy of solute transport models. *Water Resour. Res.* **35** (12), 3961-3966.
- [115] Sanford, W.E.; Konikow, L.F. (1985): A two-constituent solute transport model for ground water having variable density. U.S. Geological Survey Water Resources Investigation Report 85-4279, 89 p.
- [116] Schäfer, W. (2000): Implementation of redox reactions in groundwater models. In: J. Schüring, H.D. Schulz, W.R. Fischer, J. Böttcher und W.H.M. Duijnisveld (Hrsg.): Redox - Fundamentals, Processes and Applications. Springer, Berlin, 111 - 119.
- [117] Schäfer, W.; Kinzelbach, W. (1991): Numerical investigation into effects of aquifer heterogeneity on in-situ bioremediation. In: In-Situ and On-Site Bio-reclamation, Proceedings of an International Symposium, San Diego.

- [118] Scholten, H.; van der Tol, M. W.M. (1998): Quantitative Validation of Deterministic Models: When is a Model Acceptable? In: Proceedings of the Summer Computer Simulation Conference, 404-409
- [119] Schwille (1960): Gutachten: Ist die Trinkwassergewinnungsanlage der Stadt Neuwied im Engerser Feld durch den Bau eines Rheinhafens bei Strom-Kilometer 605,5 und eine sich an den Hafen anschließende Industrieansiedlung gefährdet? - Bundesanstalt für Gewässerkunde; Koblenz
- [120] Shrestha, S. P.; Loganathan, G. V. (1994): Monte Carlo Simulation and Effective Medium Approximation in Subsurface Flow Modeling. *Ground Water* **32** (6), 929-936.
- [121] Sinowski, W.; Scheinost, A.; Auerswald, K. (1994): Die Regionalisierung aus Pedotransfer-Funktionen abgeleiteter Bodeneigenschaften. *Mitteilgn. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch.* **74**, 237-238.
- [122] Smith, L.; Schwartz, F.W. (1981): Mass transport: 2. Analysis of uncertainty in prediction. *Water Resour. Res.* **17** (2), 351-369.
- [123] Soutter, M.; Musy, A. (1998): Coupling 1D Monte-Carlo simulations and geostatistics to assess groundwater vulnerability to pesticide contamination on a regional scale. *J. Contam. Hydrol.* **32**, 25-39.
- [124] Sudicky, E. A. (1986): A Natural Gradient Experiment on Solute Transport in a Sand Aquifer: Spatial Variability of Hydraulic Conductivity and Its Role in the Dispersion Process. *Water Resour. Res.* **22** (13), 2069-2082.
- [125] Sudicky, E. A.; Huyakorn, P. S. (1991): Contaminant migration in imperfectly known heterogeneous groundwater systems. *Reviews of Geophysics, Supplement*, April 1991, 240-253.
- [126] Sun, N.-Z. (1996): *Mathematical Modeling of Groundwater Pollution*. Springer, New-York, Berlin.
- [127] Sun, N. Z.; Yang, S.; Yeh, W. G. (1998): A proposed stepwise regression method for model structure identification. *Water Resour. Res.* **34** (10), 2561-2572.
- [128] Theis, C.V. (1967): *Aquifers and models*. In: Proceedings of the Symposium on Ground-Water Hydrology, ed. M.A. Marino. Minneapolis: American Water Resources Association.
- [129] Tietje, O. (1993): *Räumliche Variabilität bei der Modellierung der Bodenwasserbewegung in der ungesättigten Zone*. Dissertation Techn. Univ. Braunschweig.
- [130] Toussaint, B. (1994): *Umweltproblematik und Hydrogeologie der Erkundung von Boden- und Grundwasser-Kontaminationen durch leichtflüchtige haloge-*

- nierte Kohlenwasserstoffe. Heft 168 Schriftenreihe: Umweltplanung, Arbeits- und Umweltschutz, Hessische Landesanstalt für Umwelt.
- [131] Ünlü, K.; Nielsen D. R.; Biggar, J. W. (1990). Stochastic Analysis of Unsaturated Flow: One-Dimensional Monte Carlo Simulations and Comparisons with Spectral Perturbation Analysis and Field Observations. *Water Resour. Res.* **26** (9), 2207-2218.
- [132] US Department of Energy's (2000) Environmental Management Science Program, Research needs in subsurface science. Nat. Academy Press, Washington D.C..
- [133] Wagner, B. J.; Gorelick, S. M. (1989): Reliable Aquifer Remediation in the Presence of Spatially Variable Hydraulic Conductivity: From Data to Design. *Water Resour. Res.* **25** (10), 2211-2225.
- [134] Wang, M.; Zheng, C. (1997): Optimal remediation policy selection under general conditions. *Ground Water* **35** (5), 757-764.
- [135] Waterloo Hydrogeologic (2000): Visual MODFLOW V.2.8.2 User's Manual. Waterloo Hydrogeologic Inc., Ontario, Canada.
- [136] Williams, R. (1988): Comment on: "Statistical theory of groundwater flow and transport: pore to laboratory, laboratory to formation, and formation to regional scale" by G. Dagan. *Water Resour. Res.* **24** (7), 1197-1200.
- [137] Woodbury, A. D.; Sudicky E. A. (1991). The Geostatistical Characteristics of the Borden Aquifer. *Water Resour. Res.* **27** (4), 533-546.
- [138] Yeh, T. C. (1992): Stochastic modelling of groundwater flow and solute transport in aquifers. *Hydrological Processes*, 6, 369-395.
- [139] Zheng, C. (1990): MT3D, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater. Report to the USEPA, 170 pp.
- [140] Zhu, H.; Journel, A. G. (1992): Formatting and integrating soft data: Stochastic imaging via the Markov-Bayes algorithm. In: *Geostatistics Troia '92* **1**: 1-11.
- [141] Zimmermann, D. A., Wilson, J. L. (1990): TUBA: A computer code for generating two-dimensional random fields via the turning bands method. A User Guide, Seasoft, Albuquerque, New Mexico.
- [142] Zimmerman, D. A.; Marsily de, G.; Gotway, C. A.; Marietta, M. G.; Axness, C. L.; Beauheim, R. L.; Bras, R. L.; Carrera, J.; Dagan, G.; Davies, P. B.; Gallegos, D. P.; Galli, A.; Gómez-Hernández, J.; Grindrod, P.; Gutjahr, A. L.; Kitanidis, P. K.; Lavenue, A. M.; Laughlin Mc, D.; Neuman, S. P.; Ramarao, B. S.; Ravenne, C.; Rubin, Y. (1998): A comparison of seven geostatistically based inverse approaches to estimate transmissivities for modeling advective transport by groundwater flow. *Water Resour. Res.* **34** (6), 1373-1413.

